

T.M.  
(043)53  
2021  
F397

## TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

### **ESTUDIO NUMÉRICO DE EXCITACIONES ELECTRÓNICAS EN SISTEMAS UNIDIMENSIONALES MULTIORBITALES CORRELACIONADOS**

**Hernán Fernández García**  
Maestrando

**Dra. Karen Hallberg**  
Directora

#### **Miembros del Jurado**

Dr. Pablo Cornaglia (Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche)

Dr. Armando Aligia (Instituto Balseiro, Centro Atómico Bariloche)

Dr. Cristian Batista (University of Tennessee)

17 de marzo de 2021

Teoría de la Materia Condensada – Centro Atómico Bariloche

Instituto Balseiro  
Universidad Nacional de Cuyo  
Comisión Nacional de Energía Atómica  
Argentina

INVENTARIO: 24145  
16.07.2021  
Biblioteca Leo Falicov

# Índice de contenidos

Índice de contenidos	iii
Índice de figuras	v
Índice de tablas	ix
Índice de símbolos	xi
Resumen	xiii
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Modelo de Kanamori-Hubbard . . . . .	5
<b>2. Método Empleado</b>	<b>7</b>
2.1. Funciones de onda de muchos cuerpos: base producto . . . . .	7
2.1.1. Base óptima . . . . .	8
2.2. DMRG tradicional . . . . .	10
2.3. Formulación MPS . . . . .	12
2.3.1. Descomposición SVD . . . . .	14
2.3.2. Libertad de <i>gauge</i> MPS. Canonización y aproximación. . . . .	15
2.3.3. Solapamientos de MPS . . . . .	16
2.3.4. Norma de MPS . . . . .	18
2.4. Operadores MPO . . . . .	18
2.4.1. Elementos de matriz de un MPO. . . . .	19
2.5. Álgebra de MPS/MPO . . . . .	20
2.5.1. Adición de MPS/MPO. . . . .	20
2.5.2. Multiplicación de MPO. . . . .	21
2.5.3. Escaleo de MPS/MPO. . . . .	22
2.6. Método DMRG-MPS . . . . .	23
2.6.1. Hamiltoniano efectivo local. . . . .	24
2.6.2. Algoritmo implementado. . . . .	26
2.7. Uso en materia condensada . . . . .	28

---

2.8. Aplicación concreta al modelo de Kanamori-Hubbard . . . . .	30
2.8.1. Interpretaciones de sitio MPS alternativas . . . . .	30
2.8.2. Orden MPS . . . . .	30
<b>3. Propiedades dinámicas</b>	<b>33</b>
3.1. Cálculo de excitaciones Doblón-Holón . . . . .	35
<b>4. Resultados</b>	<b>39</b>
4.1. Modelo KH sin interacción de Hund ( $J = 0$ ) . . . . .	39
4.1.1. Bandas de diferente ancho ( $t_1 \neq t_2$ ) . . . . .	39
4.1.2. Bandas iguales ( $t_1 = t_2$ ) . . . . .	42
4.2. Modelo KH con interacción de Hund ( $J \neq 0$ ) . . . . .	43
4.3. Caracterización de las excitaciones . . . . .	44
4.4. Funciones espectrales . . . . .	46
4.5. Comparación de órdenes MPS alternativos . . . . .	48
4.6. Análisis de tamaño . . . . .	50
4.7. Comparación con condiciones de contorno periódicas. . . . .	50
<b>5. Conclusiones</b>	<b>53</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>57</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>61</b>

# Índice de figuras

1.1. Ejemplos de comparaciones de mediciones experimentales y cálculos numéricos de densidades de estados en publicaciones recientes. . . . .	2
1.2. Representación gráfica de una configuración arbitraria del modelo de Kanamori-Hubbard de dos orbitales estudiado en este trabajo. Las cadenas inferior y superior corresponden a los orbitales $\alpha = 1$ y $\alpha = 2$ , respectivamente. Las flechas rojas representan electrones con la proyección de espín correspondiente. Los círculos azules indican sitios de orbital desocupados (holón). Se señalan con $t_\alpha$ , $U$ , $V$ y $J$ , respectivamente, hoppings de electrones en el orbital $\alpha$ , interacciones por repulsión coulombiana intra-orbital e inter-orbital, y acoplamiento de Hund. Se encierran y marcan como <b>HD</b> las cuasipartículas Doblón-Holón presentes (sección 3.1). . . . .	6
2.1. Esquema de particiones de DMRG tradicional. . . . .	11
2.2. Cadena de espines de Heisenberg de 6 sitios biparticionada simétricamente. $\hat{S}_3^A$ y $\hat{S}_1^B$ ( <i>links</i> ) conectan entre sí las partes $A$ y $B$ . . . . .	12
2.3. Representación gráfica de un sitio MPS. $F$ representa el índice físico. $V_I$ y $V_D$ representan los índices virtuales que conectan con los sitios vecinos por izquierda y derecha respectivamente. . . . .	13
2.4. Representación gráfica de la contracción de dos sitios MPS vecinos, trazando sobre el índice virtual que los une. . . . .	13
2.5. Representación gráfica de un MPS de 6 sitios. . . . .	14
2.6. Representación gráfica de las contracciones sucesivas a realizar para el cálculo de la proyección ( <i>overlap</i> ) entre dos MPS $S$ y $Z$ . Se contrae sobre todos los índices virtuales y físicos, obteniéndose el <i>overlap</i> (escalar). . .	17
2.7. Representación gráfica de un MPO de 6 sitios. . . . .	19

2.8. Representación gráfica del cálculo de un elemento de matriz de un MPO $O$ entre dos MPS $S$ y $Z$ , para un sistema de tamaño 6. Deben contraerse todos los sitios, trazando sobre todos los índices, obteniendo el valor escalar correspondiente al elemento de matriz del operador $O$ entre los estados $S$ y $Z$ . . . . .	19
2.9. Representación gráfica de la multiplicación de dos sitios MPS $A_i$ y $B_i$ , contrayendo sobre el índice físico que los une ( $\sigma''$ ), para construir el nuevo sitio $C_i$ del MPO $C = A \cdot B$ . . . . .	22
2.10. Operador hamiltoniano efectivo de un sitio. . . . .	25
2.11. Representación gráfica de la contracción de todos los sitios a la izquierda y derecha del sitio $i$ , construyendo los objetos $H_i^L$ y $H_i^R$ respectivamente, usados para computar $H_i^{eff}  S_i\rangle$ , costando $\sim m_S^3$ . . . . .	27
2.12. Representaciones MPS de un modelo KH de $L = 4$ sitios físicos (ver Figura 1.2), arreglando los sitios MPS $S_i^{\alpha\sigma}$ siguiendo cuatro posibles órdenes (no usados para los cálculos centrales de este trabajo, solo en la Sección 4.5 a modo de comparación). El subíndice $i$ indica el sitio físico en la red, y los supraíndices $\alpha$ y $\sigma$ representan orbital y espín respectivamente. . . . .	32
2.13. Sitios MPS en un modelo KH de $L = 4$ sitios físicos, siguiendo el orden CROSS, usado en este trabajo para maximizar la eficiencia de DMRG-MPS. El subíndice $i$ indica el sitio físico en la red, y los supraíndices $\alpha$ y $\sigma$ , representan orbital y espín respectivamente. . . . .	32
4.1. Densidad de estados (azul y naranja) y funciones espectrales de la excitación HD (verde y rojo), separadas por orbital, para distintos valores de la interacción inter-orbital, en un sistema KH con bandas de diferente ancho. $L = 12$ , $t_1 = 0,5$ , $t_2 = 0,25$ , $U = 4$ , $J = 0$ , $\mu = -1,2$ . . . . .	41
4.2. Densidad de estados (azul y naranja) y funciones espectrales de la excitación HD (verde y rojo), separadas por orbital, en función del potencial químico, en un sistema KH con bandas de diferente ancho. $L = 12$ , $t_1 = 0,5$ , $t_2 = 0,25$ , $U = 4$ , $V = 2$ , $J = 0$ . . . . .	41
4.3. Densidad de estados (azul) y función espectral de la excitación HD (verde), en un sistema KH de bandas iguales, para distintos valores de la interacción inter-orbital ( $\mathbf{a}$ ), y en función del potencial químico (b). Se grafica solo el orbital $\alpha = 1$ , ya que ambos son equivalentes. Se observa la UHB alrededor de $\omega \approx 5$ . . . . .	42
4.4. Ocupaciones $N$ vs $\mu$ para un sistema KH de bandas iguales $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ , $V = 2$ , $J = 0$ . . . . .	43

4.5. Densidad de estados (azul) y función espectral de la excitación HD (verde), en un sistema KH de bandas iguales, para distintos valores de la acoplamiento de Hund. $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ , $V = 2$ , $\mu = -2$ . Se observa la UHB alrededor de $\omega \approx 5$ . . . . .	44
4.6. Densidad de estados y excitaciones $ \uparrow\downarrow, 0\rangle$ , $ \uparrow, 0\rangle$ , $ \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$ , $ \uparrow, \uparrow\rangle$ , $ \uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$ y $ \uparrow, \downarrow\rangle$ , en sistemas KH de bandas iguales. $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ . La UHB se encuentra alrededor de $\omega \approx 5$ para <b>a</b> y $\omega = 6$ para <b>b</b> (con poco peso), para <b>c</b> y <b>d</b> queda a energías fuera del rango de las figuras. .	46
4.7. Funciones espectrales $A(k, \omega)$ y $A_{ \uparrow\downarrow, 0\rangle}(k, \omega)$ , en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $J = 0$ , $\mu = -2$ , con condiciones periódicas de contorno. Las escalas de colores (unidades arbitrarias) se muestran solo para permitir la comparación entre $A(k, \omega)$ y $A_{ \uparrow\downarrow, 0\rangle}(k, \omega)$ en cada sistema. . . . .	47
4.8. Comparación de resultados de densidad de estados (DOS) y excitación HD, en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ , $J = 0$ , $\mu = -2$ , variando el orden de sitios en las representaciones MPS usadas para los cálculos de DMRG. . . . .	49
4.9. Comparación de densidades de estados y excitación HD al variar el tamaño de un sistema KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ , $V = 2$ , $J = 0$ , $\mu = -2$ . . . . .	50
4.10. Comparación de densidades de estados (DOS) y excitación HD al variar las condiciones de contorno en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund $L = 12$ , $t_1 = t_2 = 0,5$ , $U = 4$ , $V = 2$ , $J = 0$ , $\mu = -2$ . . . . .	51





# Índice de tablas

3.1. Energía de cada configuración atómica, en aproximación local. Extraído de <a href="#">[1]</a> . . . . .	37
--	----



# Índice de símbolos

DMRG	Renormalización basada en la matriz densidad (del inglés Density-Matrix Renormalization Group)
DMFT	Teoría de campo medio dinámico (del inglés Dynamical Mean Field Theory)
DFT	Teoría del funcional densidad (del inglés Density-Functional Theory)
MPS	Estado producto de matrices (del inglés Matrix-Product State)
MPO	Operador producto de matrices (del inglés Matrix-Product Operator)
KH	Modelo de Kanamori-Hubbard
UHB	Banda superior de Hubbard (del inglés Upper Hubbard-Band)
LHB	Banda inferior de Hubbard (del inglés Lower Hubbard-Band)
QP	Cuasipartícula (del inglés quasiparticle)
SVD	Descomposición en valores singulares (del inglés Singular Value Decomposition)



# Resumen

Estudiamos numéricamente propiedades electrónicas estáticas y dinámicas del modelo unidimensional de Kanamori-Hubbard de dos orbitales, usando métodos basados en el grupo de renormalización de la matriz densidad. Consideramos dos casos, uno en el que ambos orbitales forman bandas de diferente ancho, y otro en el que forman bandas iguales.

En sistemas con bandas de diferente ancho, encontramos en este modelo extendido excitaciones que consisten principalmente en cuasipartículas formadas por un orbital doblemente ocupado (doblón) y el orbital correspondiente en el mismo sitio vacío (holón), en consistencia con las excitaciones similares reportadas en una red cuadrada usando la aproximación de campo medio dinámica.

Observamos también estas excitaciones doblón-holón en sistemas de bandas iguales. En este caso, vemos *dips* en las densidades de estados en el nivel de Fermi, que no parecen corresponder a un *gap* de excitaciones. Detectamos el ensanchamiento de la banda de holón-doblón por efecto del acoplamiento de Hund, aunque no distinguimos una clara separación con  $J$ , como ha sido reportado en resultados previos para una red cuadrada en aproximación de campo medio dinámica.

Caracterizamos las densidades de estados en términos de excitaciones locales compuestas. Identificamos claramente la disminución de la densidad de estados cerca del nivel de Fermi, y el angostamiento de los picos por sobre y debajo de esta energía, al aumentar la interacción inter-orbital.

También calculamos las densidades espectrales y observamos que las excitaciones holón-doblón aparecen con mayor peso en los bordes de la banda.

Añadimos por completitud el estudio comparativo de resultados usando distintos órdenes para las representaciones de estados producto de matrices que empleamos en nuestros métodos, de donde comprobamos la superioridad en precisión (para este modelo) del orden usado. Incluimos también un análisis de efectos de tamaño finito y condiciones de contorno, como validación de estabilidad de estos cálculos numéricos.

**Palabras clave:** HUBBARD, CORRELACIONES, CUASIPARTÍCULA, EXCITACIÓN, DINÁMICA



# Capítulo 1

## Introducción

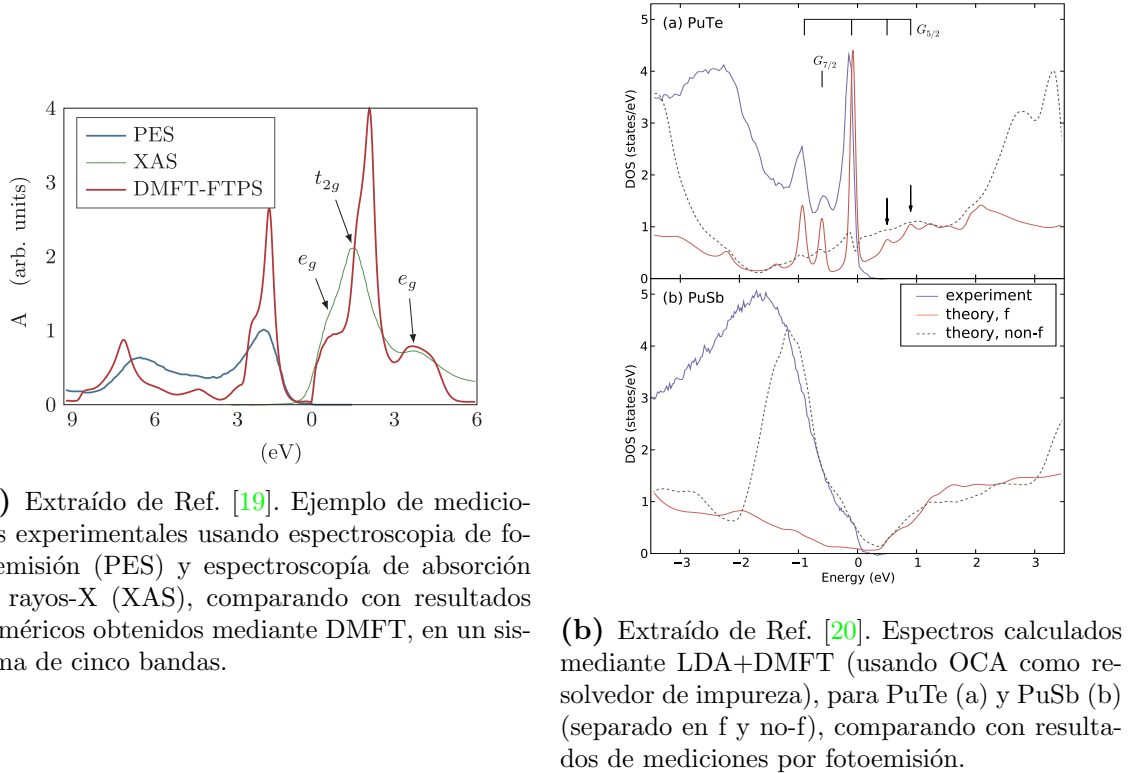
La física de los llamados “materiales cuánticos” [2] es una rama particularmente compleja dentro de la teoría de la materia condensada, ya que estos exhiben comportamientos que no pueden ser explicados mediante un esquema semiclásico [3], sino que es necesario, en general, hacer uso de conceptos de topología [4] y correlaciones electrónicas [5]. Además, existen fuertes motivaciones tecnológicas en el estudio de estos sólidos con electrones fuertemente correlacionados, ya que muchos exhiben propiedades valiosas para aplicaciones técnicas, como por ejemplo: la ferroelectricidad ( $PbZr_xTi_{1-x}O_3$ ,  $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$ ), el ferromagnetismo ( $Co$ ,  $Fe$ ,  $Ni$ ), el anti-ferromagnetismo ( $Cr$ ,  $FeMn$ ,  $NiO$ ), las transiciones metal-aislante [6], la superconductividad de alta temperatura [7], los fermiones pesados [8], la magneto-resistencia gigante y el alto poder termoeléctrico. Especialmente, es de gran interés el estudio de modelos interactuantes de varias bandas donde coexistan electrones itinerantes y localizados, como por ejemplo: superconductores basados en hierro, óxidos de metales de transición (rutenatos y manganitas), compuestos de plutonio y uranio, en los cuales, la dinámica de muchos cuerpos, típicamente difícil de analizar teóricamente, puede dar lugar a complejos multipletes y estados intra-gap.

Sistemas que pueden ser modelados como cadenas unidimensionales (1D) son de especial interés, ya que se han desarrollado métodos computacionales eficientes, como DMRG [9, 10, 11, 12] y Lanczos [13, 14], capaces de resolver modelos hamiltonianos de este tipo con buena precisión. En dimensiones mayores, sin embargo, donde estos resultados serían de mayor utilidad para comparar con mediciones experimentales, estos cálculos se hacen más computacionalmente costosos.

Una ventaja importante que ofrece el estudio de sistemas unidimensionales mediante estos métodos, es que hace posible la simulación de materiales que presenten propiedades topológicas y correlaciones electrónicas en simultáneo. Las excitaciones que emergen de estas fuertes interacciones electrónicas en una dimensión, fenomenológicamente distintas a aquellas que tienen lugar en dimensiones mayores, no se ajustan

a un Líquido de Fermi, sino que deben ser explicadas desde la teoría de Líquido de Luttinger (LL) [15]. Una propiedad característica de estos sistemas es el hecho de que los grados de libertad elementales no son fermiones bien definidos, sino cuasipartículas colectivas separadas, asociadas a cada uno de sus números cuánticos: holón (carga) y espinón (espín), fenómeno conocido como separación carga-espín [16, 17]. La localización de electrones producto de la fuerte repulsión coulombiana en sistemas de bandas reducidas, conocido como fenómeno de Mott, es central en este campo [18]. En este sentido, es ampliamente aceptada la idea de que las fuertes correlaciones electrónicas que surgen al dopar aisladores de Mott, son un elemento fundamental para los estados metálicos y superconductores que emergen, por ejemplo, en cupratos superconductores de alta temperatura.

El estudio experimental de realizaciones concretas de sistemas multiorbitales mediante técnicas de espectroscopía tipo bombeo y prueba ha permitido analizar la dinámica colectiva de estas cuasipartículas y sus modos de decaimiento. En este sentido, es notable en resultados recientes la mejoría en el ajuste de predicciones teóricas mediante simulaciones numéricas con mediciones de laboratorio usando técnicas experimentales como *photoemission spectroscopy* (PES), *angular resolved photoemission spectroscopy* (ARPES) o *inverse photo-emission experiments* (IPE) (Figura 1.1), gracias a avances, tanto del lado experimental, como de la eficiencia y precisión de los métodos computacionales.



**Figura 1.1:** Ejemplos de comparaciones de mediciones experimentales y cálculos numéricos de densidades de estados en publicaciones recientes.



En sistemas de Hubbard multiorbitales en que, además de la repulsión coulombiana, existe un fuerte acoplamiento magnético de Hund [21], emergen, producto de las correlaciones electrónicas, una amplia variedad de fenómenos interesantes como: ondas de densidad de pares [22] y transiciones de Mott selectivas en orbital [23] [24]. Comportamientos incluso más complejos en donde, además de la carga y el espín, se separan los grados de libertad orbitales, han sido observados en aisladores de Mott de múltiples bandas [25]. Esta separación puede explicarse mediante la teoría de Líquido de Luttinger aplicada al modelo t-J efectivo que surge de mapear la dinámica de un orbitón en un modelo de Kugel-Khomskii [26] a la de un hueco en un antiferromagneto.

Estudios recientes usando modelos de Hubbard de múltiples orbitales, han revelado interesantes resultados que muestran fuertes tendencias de estos sistemas a la formación de pares de singletes. En principio, estos resultados numéricos no permiten determinar los mecanismos específicos detrás de estos comportamientos. Sin embargo, estudios partiendo de propuestas de ciertos estados variacionales, han ido llenando esta brecha conceptual. Por ejemplo, en Ref. [27], optimizando una combinación lineal de estados de Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki, los autores muestran cómo la formación de tripletes se hace estable en situaciones en donde las anisotropías en el plano fácil de la red no pueden ser despreciadas -en casos en que estas anisotropías no son importantes, este modelo de Hubbard semillando (sin dopar) es similar a una cadena de Haldane. Además, demuestran que al dopar con huecos sistemas unidimensionales (cadenas de Hubbard 1D de dos orbitales similares), se observa formación de pares de singletes, que puede ser inducida por fluctuaciones magnéticas. La importancia fundamental de estos resultados es que, si la formación de estos pares realmente ocurre en sistemas unidimensionales, el mismo hamiltoniano es de esperar que produzca comportamientos similares en dimensiones mayores, donde estas técnicas dejan de ser efectivas.

Por otro lado, en Ref. [28], realizando simulaciones en el ensamble canónico mediante DMRG, detectan formación de pares en un sistema de dos orbitales en estado  $\frac{1}{4}$ -lleno, al notar saltos discretos de a dos (ver Figura 4 en [28]) en las curvas de ocupación de cada orbital en función del parámetro de splitting ( $\Delta$ ) con que controlan en el hamiltoniano la diferencia en las energías de sitio entre ambos orbitales. Analizando también las funciones de distribución de momento (transformadas de Fourier de las correlaciones espaciales) de excitones (creados al promover un electrón a la banda superior), y biexcitones (formados por dos de estos excitones ligados por interacción de Heisenberg entre electrones en el mismo orbital), encuentran indicios formación de cuasicondensados de excitones con momento de centro de masa finito (una onda de densidad de carga), reflejados como picos en valores de  $k \neq 0$ . Muestran además la existencia de una zona de parámetros en la cual el sistema se encuentra en una fase en que uno de los orbitales se comporta como un Líquido de Luttinger, mientras el otro presenta inestabilidades de formación de pares.

El estudio presentado en Ref. [27], se centra en un análisis estático de las poblaciones, en el estado fundamental, de cuasipartículas compuestas por dos electrones formando un singlete efectivo localizado, entre dos sitios de la red vecinos en diagonal (orbitales distintos e índices de red consecutivos, ver Figura 1 en Ref. [27]), y el decaimiento de las correlaciones espaciales de estos singletes. Los autores resuelven que en el estado dopado, al remover uno de estos singletes, los huecos resultantes se comportan como pares efectivos que adquieren movilidad en la red. Sin embargo, los métodos empleados no les permiten analizar la dinámica de estos pares y, los estados variacionales propuestos dejan de ser una buena representación del estado fundamental en sistemas fuera del límite altamente interactuante (en comparación con el ancho de las bandas), debido posiblemente al efecto de fluctuaciones de carga presentes. El acercamiento que proponemos en este trabajo es en este sentido menos restrictivo y más centrado en un estudio dinámico a partir del análisis de densidades de estados y funciones respuesta de operadores asociados a la creación de ciertas cuasipartículas definidas, que entendemos juegan un papel importante en la física del modelo estudiado.

Durante este trabajo de Maestría en Ciencias Físicas, hemos estudiado un modelo hamiltoniano de gran interés en teoría de la materia condensada: el modelo de Kanamori-Hubbard (KH) (sección 1.1). Una motivación central para este trabajo fue poder detectar la presencia de excitaciones bien definidas en energía, que han sido previamente observadas en dimensión  $D = 2$ , en sistemas con bandas de diferente ancho, usando Dynamical Mean Field Theory (DMFT) [29] [1]. Estos resultados previos indican que dicha excitación está dada por la generación de lo que llamamos *Doblón-Holón* (DH): una combinación de un sitio de Hubbard doblemente ocupado (doblón) en uno de los orbitales, y uno vacío (holón) en el otro (ambos en el mismo sitio de la red), que juntos se comportan como una sola partícula compuesta.

Para entender el origen microscópico de estos comportamientos complejos, es importante disponer de métodos numéricos que permitan obtener resultados suficientemente precisos como para capturar la física relevante. Los resultados presentados en este trabajo fueron obtenidos mediante un método numérico basado en *Density Matrix Renormalization Group* (DMRG) utilizando la técnica de *Matrix Product States* (MPS) usando redes tensoriales, para aproximar variacionalmente estados fundamentales y funciones espectrales. Estudiamos la respuesta dinámica de este modelo, y la contribución de estas cuasipartículas, en distintas zonas de su espacio de parámetros, dopando con huecos el sistema y variando las interacciones coulombianas interorbitales y el acoplamiento de Hund.

Este trabajo está organizado en 5 capítulos. En Cap. 1 damos un panorama general de los avances en el estudio de sistemas de electrones altamente correlacionados, particularmente cadenas de Hubbard de múltiples orbitales, y presentamos el modelo hamiltoniano estudiado (sección 1.1). En Cap. 2 y Cap. 3 detallamos los métodos numéricos usados para los cálculos de estados fundamentales y funciones de Green respectivamente, desde las ideas conceptuales básicas, hasta la aplicación práctica al problema estudiado, incluyendo una explicación cualitativa (sección 3.1) de la presencia de excitaciones holón-doblón (HD) con energías características dentro del gap entre las bandas de Hubbard superior (UHB) e inferior (LHB). En Cap. 4, mostramos los resultados obtenidos y analizamos sus implicaciones en la física de estos sistemas. Finalmente, en Cap. 5, condensamos las conclusiones fundamentales a que arribamos.

## 1.1. Modelo de Kanamori-Hubbard

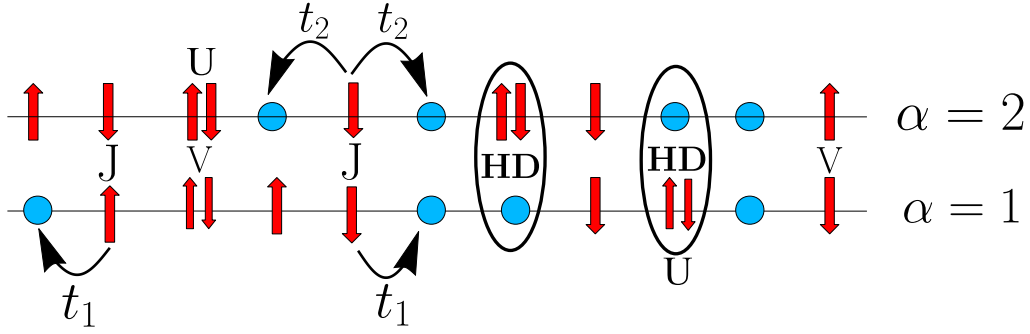
El modelo de Kanamori-Hubbard (KH) [30] [21] que estudiamos en este trabajo (Figura 1.2), consiste en una cadena unidimensional de tamaño  $L$  con condiciones de contorno abiertas, formada por sitios de dos orbitales, cada uno de los cuales se comporta como un sitio de Hubbard: puede tener ocupaciones 0, 1 (*up* y *down*), o 2. Las interacciones consideradas son:

- intra-orbital: repulsión coulombiana tipo Hubbard entre dos electrones ocupando (doblemente) un mismo orbital de un mismo sitio
- inter-orbital: análoga a la intra-orbital, pero entre dos electrones que ocupen orbitales distintos de un mismo sitio
- acoplamiento magnético de Hund de intercambio local entre orbitales distintos de un mismo sitio
- hoppings entre electrones de sitios vecinos, manteniendo orbital y proyección de espín.

de modo que el hamiltoniano del modelo puede escribirse como

$$H = \sum_{\langle ij \rangle \alpha \sigma} t_{\alpha} c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\alpha\sigma} - (\mu - \epsilon) \sum_i n_i + \sum_i \hat{V}_i, \quad (1.1)$$

en términos de operadores de creación ( $c^{\dagger}$ ) y destrucción ( $c$ ) de electrones. La notación  $\langle ij \rangle$  en las sumatorias, indica que las mismas se realizan solo sobre sitios primeros vecinos. Los índices  $\alpha \in \{1, 2\}$  y  $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$  indican orbital y proyección de espín respectivamente.



**Figura 1.2:** Representación gráfica de una configuración arbitraria del modelo de Kanamori-Hubbard de dos orbitales estudiado en este trabajo. Las cadenas inferior y superior corresponden a los orbitales  $\alpha = 1$  y  $\alpha = 2$ , respectivamente. Las flechas rojas representan electrones con la proyección de espín correspondiente. Los círculos azules indican sitios de orbital desocupados (holón). Se señalan con  $t_\alpha$ ,  $U$ ,  $V$  y  $J$ , respectivamente, hoppings de electrones en el orbital  $\alpha$ , interacciones por repulsión coulombiana intra-orbital e inter-orbital, y acoplamiento de Hund. Se encierran y marcan como **HD** las cuasipartículas Doblón-Holón presentes (sección 3.1).

La magnitud de los términos de hopping a primeros vecinos de cada orbital  $\alpha$  está dada por el parámetro  $t_\alpha$  correspondiente ( $t_1$  y  $t_2$ ), y  $n_i = \sum_{\alpha\sigma} c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\alpha\sigma}$  representa el operador número de partículas en el sitio  $i$ . Las interacciones de sitio ( $\hat{V}_i$ ) son de la forma

$$\begin{aligned} \hat{V}_i = & U \sum_{\alpha} n_{i\alpha\uparrow} n_{i\alpha\downarrow} + \sum_{\sigma\sigma'} (V - J\delta_{\sigma\sigma'}) n_{i1\sigma} n_{i2\sigma'} \\ & - J \left( c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\downarrow}^\dagger c_{i2\uparrow} + c_{i1\downarrow}^\dagger c_{i1\uparrow} c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow} \right) \\ & - J \left( c_{i1\uparrow}^\dagger c_{i1\downarrow} c_{i2\uparrow} c_{i2\downarrow} + c_{i2\uparrow}^\dagger c_{i2\downarrow} c_{i1\uparrow} c_{i1\downarrow} \right), \end{aligned} \quad (1.2)$$

donde  $J \geq 0$  parametriza el acoplamiento magnético de Hund de intercambio local, y  $U$  ( $V$ ) pesa las interacciones de Coulomb intra (inter)-orbital, respectivamente. Se añade también un potencial químico  $\mu$ , tal que  $\mu = 0$  corresponde a bandas semillenas, lo cual se consigue fijando las energías de sitio como  $\epsilon = -U/2 - V + J/2$ .

Este modelo ha sido ampliamente utilizado en el estudio de sistemas de electrones fuertemente correlacionados [1, 30, 31], como los que se encuentran en capas  $d$  o  $f$  parcialmente llenas en óxidos de metales de transición y sólidos moleculares, sujetos a fuertes interacciones inter-orbitales.

# Capítulo 2

## Método Empleado

Hemos hecho uso de algoritmos eficientes, desarrollados en nuestro grupo de investigación [32], que implementan versiones optimizadas de DMRG, basadas en Estados Producto de Matrices (MPS) y Operadores Producto de Matrices (MPO) [33]. Hemos adaptado estos algoritmos para ser aplicados al modelo estudiado. Al mismo tiempo, hemos desarrollado códigos independientes, para comprender mejor los detalles de su funcionamiento, incluyendo una implementación sobre CUDA-C++ [34], explotando las ventajas de paralelización que ofrecen las tarjetas gráficas modernas. Los algoritmos de DMRG usados nos han permitido calcular, con buena precisión, propiedades estáticas (estados fundamentales) y dinámicas (funciones de Green), de los sistemas estudiados.

Si bien una parte de los métodos que a continuación se explican fueron presentados en detalle en el trabajo de Tesina de Licenciatura en Ciencias Físicas del cual la presente Tesis de Maestría es continuación, se incluyen también en este informe con el propósito de hacerlo autocontenido. Igualmente, una adición importante en este sentido, es el análisis detallado que presentamos en la subsección 2.8.2 sobre los distintos órdenes que examinamos para las representaciones MPS del sistema que estudiamos, complementado con una comparación de resultados que mostramos en la sección 4.5, donde puede notarse la superioridad de precisión del orden que finalmente adoptamos para nuestros cálculos.

### 2.1. Funciones de onda de muchos cuerpos: base producto

El origen fundamental de la complejidad intrínseca de los sistemas cuánticos de muchos cuerpos radica en el crecimiento exponencial del espacio de configuraciones en función del número de partículas. Para un sistema cuántico de  $N$  partículas (compuesto por  $N$  subsistemas), este espacio de fases disponible puede describirse usando la

llamada base producto: el conjunto ( $B_{prod}$ ) de vectores resultante de considerar todos los productos ( $B_{i_1, i_2, \dots, i_N}$ ) posibles tomando un vector base ( $|b_{i_j}\rangle$ ) de cada subsistema  $j$ .

$$B_{prod} := \{B_{i_1, i_2, \dots, i_N} := |b_{i_1}\rangle |b_{i_2}\rangle \cdots |b_{i_N}\rangle \mid i_j \in [1, \dim(\mathcal{H}_j)]\},$$

donde  $\dim(\mathcal{H}_j)$  representa la dimensión del espacio de fases (espacio de Hilbert) correspondiente al subsistema  $j$ , y  $|b_{i_j}\rangle$  el vector  $i$ -ésimo de su base  $b_j$ . Un estado arbitrario del sistema completo, puede entonces escribirse como combinación lineal de estos  $B_{\{i_j\}}$ .

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{i_j\}} c_{\{i_j\}} B_{\{i_j\}} = \sum_{\{i_j\}} c_{\{i_j\}} \prod_j |b_{i_j}\rangle$$

Dado que la base usada para generar el espacio de fases de cada subsistema no es única, la base producto tampoco. Realizar rotaciones sobre las  $b_j$  cambia la base producto resultante, y por tanto, los coeficientes de expansión correspondientes a un dado estado del sistema. En particular, dado un conjunto  $\{b_j\}$  de bases de los subsistemas, y con ello la base producto resultante, el estado fundamental  $|\Psi_0\rangle$  del sistema corresponde a un cierto conjunto de valores  $c_{\{i_j\}}^0$  de coeficientes de expansión. O sea, la información de  $|\Psi_0\rangle$  está contenida en estos  $\dim(\mathcal{H}) = \prod_j \dim(\mathcal{H}_j)$  coeficientes, cuyo número, tomando  $\dim(\mathcal{H}_j) = \dim(\mathcal{H}_{sub}) \forall j$ , crece exponencialmente con  $N$ , haciéndose rápidamente intratable.

Afortunadamente, si bien para hallar  $|\Psi_0\rangle$  de forma exacta es estrictamente necesario conocer todos los  $c_{\{i_j\}}^0$ , pueden obtenerse buenas aproximaciones considerando tan solo unos pocos de estos coeficientes, como se verá a continuación.

### 2.1.1. Base óptima

Una observación interesante, y que da origen a soluciones efectivas, consiste en notar que, si bien todos los estados de la base producto pueden contribuir a la función de onda del estado fundamental de un sistema, en la práctica son comunes los casos en que, escogiendo convenientemente las bases de los subsistemas, casi todo el peso termina concentrado en un pequeño conjunto de estados. Esto permite entonces dar una buena aproximación del estado fundamental, usando una base de dimensión considerablemente menor; y lo mismo es usual que se cumpla también para los primeros excitados. Esto resulta útil ya que son los estados de menor energía los que rigen el comportamiento de los sistemas fermiónicos a temperaturas bajas con respecto al nivel de Fermi, como ocurre típicamente en metales.

¿Pero cómo encontrar esta base óptima? Una primera idea bastante natural es pensar que, al ir incrementando el tamaño (una partícula a la vez), el sistema no cambia demasiado en cada paso: no se producen grandes variaciones de los autoestados y autoenergías del hamiltoniano. De modo que parece lógico que al estado fundamental

de un sistema ligeramente más grande, contribuyan esencialmente los estados de menor energía del sistema un tanto más pequeño. Sin embargo, en la práctica no resulta tan simple, y no son muchos los casos en que puede aplicarse eficientemente esta idea. Un problema paradigmático en este sentido es el de la impureza de Kondo [35]. Una alternativa menos evidente viene del concepto de matriz densidad reducida .

El operador densidad asociado a un estado mezcla de un sistema cuántico de partículas idénticas, está definido como

$$\hat{\rho} = \sum_i \omega_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i|$$

donde  $i$  indexa los estados de una partícula  $\Psi_i$  ocupados, y  $\omega_i$  representa la fracción de partículas en cada  $\Psi_i$ . Este operador da cuenta de los estados ocupados, y contiene toda la información del sistema: es suficiente para calcular el valor de expectación de cualquier operador de una partícula.

Un sistema cuántico que se encuentre en el estado puro dado por su estado (global) fundamental  $|\Psi_0\rangle$  (sin mezcla de otros estados), tiene como operador densidad simplemente:

$$\hat{\rho} = |\Psi_0\rangle \langle \Psi_0|$$

Sin embargo, para un sistema interactuante, esto puede adoptar una forma bastante compleja, escrito matricialmente en la base producto de estados de una partícula, ya que en general, el estado fundamental resulta una superposición, con ciertos pesos, de todas las combinaciones cruzadas de estados de los subsistemas.

Dada una bipartición (A-B) de un sistema, y el operador densidad asociado a un estado dado, se define el operador densidad reducido correspondiente a la parte A como:

$$\hat{\rho}_A = Tr_B(\hat{\rho}) = \sum_b \langle b|\hat{\rho}|b\rangle$$

que análogamente contiene toda la información para el cálculo de valores de expectación de operadores actuando sobre A. De la descomposición de Schmidt [36] de  $\hat{\rho}_A$  se deduce que el autovalor correspondiente a cada autoestado, da cuenta de su peso relativo en el estado global. Este resultado ofrece un criterio útil para decidir, de entre todos los estados de un sistema de un dado tamaño, cuáles son más relevantes (tienen más peso), por ejemplo, en el estado fundamental de un sistema mayor que contenga al primero. Son entonces estos autoestados de  $\hat{\rho}_A$  de mayor autovalor, los que conviene considerar para dar una aproximación óptima del estado global, en términos de una base de dimensión mucho menor a la del espacio de fases total.

Este criterio constituye la base del método DMRG, en su implementación tradicional. En los últimos años, este método ha probado ser de gran utilidad en el estudio

de la materia condensada, permitiendo obtener muy buenas aproximaciones a cálculos de propiedades electrónicas de sólidos fuertemente correlacionados [10]. El desarrollo y aplicación de este método al cálculo de bandas electrónicas, ha hecho posible observar, con niveles de detalle antes imposibles, estructuras en las densidades espectrales de modelos hamiltonianos de interés. En este trabajo, hacemos uso de este método para estudiar un sistema correlacionado paradigmático, el modelo de Kanamori-Hubbard de dos orbitales, analizando el comportamiento dinámico de cuasipartículas originadas por las interacciones de muchos cuerpos.

## 2.2. DMRG tradicional

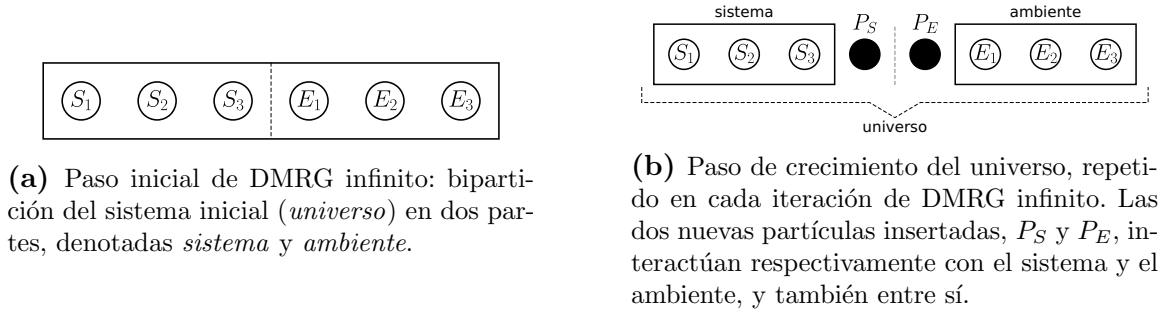
Antes de detallar los algoritmos usados, resulta útil, para comprender la física y matemática de fondo, comenzar analizando su origen, lo que hoy día llamamos DMRG tradicional. En su forma original, el método DMRG [9], aplicado al cálculo de estados fundamentales, consta de dos partes. La primera, *DMRG infinito*, consiste en (figura 2.1):

1. partir de considerar un sistema inicial (denotado *universo*) suficientemente pequeño (número par de partículas, por simplicidad), de manera que pueda ser resuelto exactamente (mediante diagonalización exacta), hallándose su estado fundamental (*target*)
2. realizar una bipartición simétrica (figura 2.1a) del universo y calcular, en cada subsistema (denotados *sistema* y *ambiente*), la matriz densidad reducida correspondiente al estado fundamental encontrado, y diagonalizarla
3. rotar las bases del sistema y el ambiente a bases reducidas generadas por los autovectores de mayor autovalor de la matriz densidad reducida correspondiente, y calcular los elementos de matriz de los operadores de interés en estas nuevas bases
4. proceder entonces iterativamente, aumentando en cada paso el tamaño del universo, introduciendo nuevas partículas ( $P_S$  y  $P_E$ ) de manera conveniente (figura 2.1b), y encontrando el estado fundamental (*target*) del nuevo hamiltoniano en la base producto resultante de las bases de cada subsistema, generadas en la iteración anterior, y bases elementales de las nuevas partículas; así hasta llegar al tamaño deseado

Análogamente puede procederse para calcular, en lugar del estado fundamental, un estado (*target*) excitado cualquiera. La figura 2.1b muestra una forma conveniente de hacer crecer el universo, agregando dos nuevas partículas: una al sistema ( $P_S$ ) y otra al



ambiente ( $P_E$ ). O sea, de manera que en cada paso el nuevo hamiltoniano del universo esté dado por los hamiltonianos de la iteración anterior más los nuevos términos de interacción: sistema- $P_S$ ,  $P_S$ - $P_E$  y  $P_E$ -ambiente.



**Figura 2.1:** Esquema de particiones de DMRG tradicional.

La segunda parte, *DMRG finito*, se trata de un proceso de refinado, en el que se realizan barridos cíclicos considerando biparticiones sucesivas, variando de a uno los tamaños de  $A$  y  $B$  (respectivamente  $N_A$  y  $N_B$ ), pero manteniendo el tamaño total  $N = N_A + N_B$  fijo:

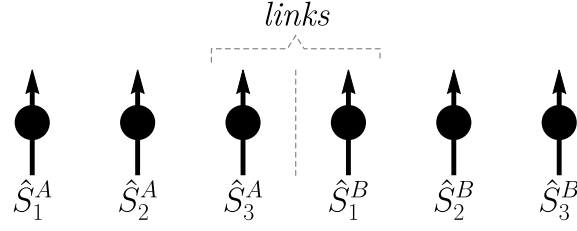
$$N_A = 1, 2, \dots, N-1, N, N-1, \dots, 2, 1, 2, \dots ; N_B = N - N_A$$

Para este barrido, se usan las bases previamente generadas en *DMRG finito* para cada tamaño, y se van actualizando en cada iteración, hasta satisfacerse algún criterio de convergencia. Por ejemplo, se pide que los dos últimos valores obtenidos para la energía del estado *target* difieran en menos de una cota superior fijada.

Notar que los operadores de interés (particularmente el hamiltoniano) deben poder construirse a partir de combinaciones (sumas y productos) de operadores restringidos a los subsistemas  $A$  y  $B$ . En el caso del hamiltoniano, típicamente es de la forma

$$H = H^A + H^B + L^A \cdot L^B$$

donde  $H^i$  es la contribución interna de la parte  $i = A, B$ , y el tercer término (*link*) representa la interacción entre ambas partes. Por ejemplo, en un modelo tipo Heisenberg,  $H^i$  contiene las interacciones internas entre los espines de  $i$ ; y  $L^A$  y  $L^B$  corresponderían a las orientaciones de los espines que conectan  $A$  con  $B$ :  $\hat{S}_{N_A}^A$  y  $\hat{S}_1^B$  (operadores de borde), donde  $\hat{S}_j^i$  representa el operador (vectorial) de espín del sitio  $j$ -ésimo de la parte  $i$ . La figura 2.2 muestra una cadena de Heisenberg de 6 sitios biparticionada simétricamente, de manera que  $\hat{S}_3^A$  y  $\hat{S}_1^B$  conectan entre sí las partes  $A$  y  $B$ .



**Figura 2.2:** Cadena de espines de Heisenberg de 6 sitios biparticionada simétricamente.  $\hat{S}_3^A$  y  $\hat{S}_1^B$  (*links*) conectan entre sí las partes A y B.

## 2.3. Formulación MPS

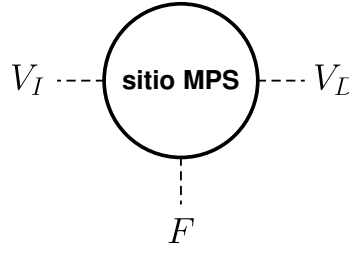
Los algoritmos usados en este trabajo se basan en una versión de este método, que consiste en encontrar variacionalmente una aproximación a la energía del estado fundamental de un sistema, considerando estados MPS (*Matrix-Product States*) del mismo [33]. Dado un sistema de  $N$  partículas, cada una con un espacio de fases  $d$ -dimensional disponible, y una base producto  $B_{prod}$  del mismo, un MPS es un estado  $S$  que puede describirse usando  $N \cdot d$  matrices denotadas  $M_i^{\sigma_i}$ , tal que la proyección de  $S$  sobre un estado  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \in B_{prod}$  puede calcularse como

$$\langle \vec{\sigma} | S \rangle = M_1^{\sigma_1} \times M_2^{\sigma_2} \times \dots \times M_N^{\sigma_N} =: S(\vec{\sigma}),$$

donde el subíndice  $i \in [1, N]$  indexa la partícula, y  $\sigma_i \in [1, d] \forall i$  representa el subestado de la partícula  $i$ -ésima. Las matrices  $M_i^{\sigma_i}$  deben tener dimensiones compatibles para las multiplicaciones, y las correspondientes a  $i = 1$  (resp.  $i = N$ ) deben ser de un fila (resp. columna); de manera que las productorias resulten en valores escalares.

El conjunto de  $d$  matrices de  $m \times m$  asociado a la partícula  $i \in [1, N]$ , denotado  $M_i := \{M_i^{\sigma_i} \mid \sigma_i \in [1, d]\}$ , es llamado *sitio MPS*  $i$ -ésimo, o simplemente sitio  $i$ -ésimo, siempre que no lleve a confusión con sitios de sistemas físicos, como ocurrirá más adelante al describir el modelo estudiado, y será necesario distinguir cada concepto. Los índices  $\sigma_i$ , que representan los subestados de cada partícula, son llamados *índices físicos*. Los dos índices internos (de fila y columna) de cada matriz  $M_i^{\sigma_i}$  (que resulta de fijar como  $\sigma_i$  el índice físico del sitio MPS  $i$ -ésimo) se denominan *índices virtuales*, y se dice que conectan cada sitio MPS  $i$  con sus vecinos ( $i - 1$  e  $i + 1$ ). Notar que las matrices  $M_1^{\sigma_1}$  (resp.  $M_N^{\sigma_N}$ ) tienen un solo valor posible para el índice virtual de fila (resp. columna), por lo cual no se lo considera un índice. La figura 2.3 muestra la representación gráfica usada para los sitios MPS y sus índices físicos y virtuales.

Se dice contraer dos sitios MPS, a la operación de multiplicarlos mediante producto interno, visto cada sitio como un tensor de orden 3 en sus índices (orden 2 si corresponde a un extremo de un MPS), o sea, trazando sobre todos los valores posibles de los índices que los unen (físicos y virtuales). Se construye así un nuevo objeto que tiene

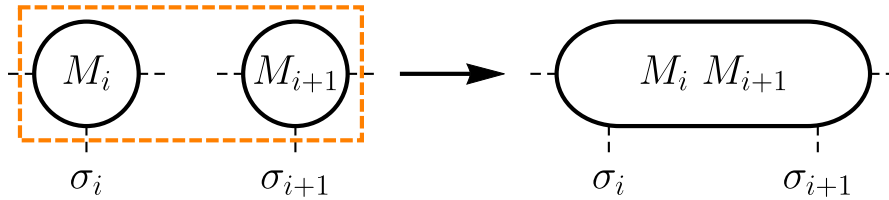


**Figura 2.3:** Representación gráfica de un sitio MPS.  $F$  representa el índice físico.  $V_I$  y  $V_D$  representan los índices virtuales que conectan con los sitios vecinos por izquierda y derecha respectivamente.

como índices solo aquellos de los sitios iniciales, que no los conectaran entre sí. Por ejemplo, la contracción de dos sitios vecinos  $M_i$  y  $M_{i+1}$  en un MPS, resulta en un objeto  $M'$  con dos índices físicos y dos virtuales, tal que, para cada par de valores de los índices físicos ( $\sigma_i$  y  $\sigma_{i+1}$ ), la matriz  $M'^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}$  resulta de la multiplicación matricial  $M'^{\sigma_i, \sigma_{i+1}} = M_i^{\sigma_i} \cdot M_{i+1}^{\sigma_{i+1}}$ , o sea,

$$M'^{\sigma_i, \sigma_{i+1}}(a, c) = \sum_b M_i^{\sigma_i}(a, b) \cdot M_{i+1}^{\sigma_{i+1}}(b, c)$$

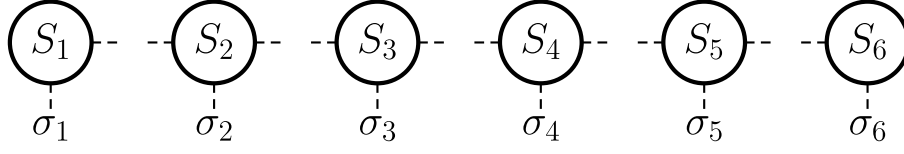
donde  $b$  es el índice virtual que une los sitios: índice de columna de  $M_i$  y de fila de  $M_{i+1}$ . La figura 2.4 muestra una representación gráfica de esta operación. Análogamente puede procederse para contraer sobre índices físicos, así como contraer sitios que compartan más de un índice.



**Figura 2.4:** Representación gráfica de la contracción de dos sitios MPS vecinos, trazando sobre el índice virtual que los une.

La proyección sobre un estado  $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$  de la base producto mostrada anteriormente, dada por la productoria de las  $M_i^{\sigma_i}$ , que constituye la definición de un MPS, corresponde entonces a fijar como  $\sigma_i$  todos los índices físicos, y contraer todos los índices virtuales que conectan cada par de sitios vecinos. La figura 2.5 muestra una representación gráfica de un MPS de 6 sitios.

Los elementos que componen el sitio MPS  $i$ -ésimo (las  $d$  matrices de  $m \times m$  en  $M_i^{\sigma_i}$ ), asociado a la partícula  $i$ , son un conjunto de  $m \cdot d \cdot m$  números, que pueden equivalentemente interpretarse (reagruparse) como un cubo (tensor de orden 3) de dimensiones  $m \times d \times m$ , o una matriz de  $md \times m$  ó  $m \times dm$ . Esta visualización resulta útil, ya que permite aplicar herramientas conocidas para matrices al trabajar con estos objetos. Sin



**Figura 2.5:** Representación gráfica de un MPS de 6 sitios.

pérdida de generalidad podemos suponer que, salvo las matrices  $M_i^{\sigma_i}$  correspondientes al primer (resp. último) sitio, que tienen una fila (resp. columna), el resto son de  $m \times m$ . En caso de no ser así, puede siempre llevarse a esta forma, tomando  $m$  como la mayor dimensión de entre todas las matrices, y agrandando el resto, rellenando con ceros. El valor de  $m$  se dice la dimensión del MPS.

Puede verse que, permitiendo matrices  $M_i^{\sigma_i}$  de dimensiones arbitrariamente grandes, pudiendo controlar tantos grados de libertad como sean necesarios, cualquier estado puede ciertamente escribirse de esta forma, de modo que formalmente todo estado es MPS (para alguna dimensión  $m$ ). Sin embargo, este cambio de coordenadas por sí solo, no simplifica el problema del espacio de fases inmenso: las dimensiones necesarias para las matrices, crecerían también exponencialmente. Pero sí, en muchos sistemas, ofrece una vía para aproximar un estado arbitrario por un MPS de dimensión considerablemente menor a la del espacio de Hilbert, por ejemplo, usando la técnica explicada a continuación.

### 2.3.1. Descomposición SVD

La descomposición en valores singulares (SVD) de una matriz  $M$  es la forma de escribirla como un producto de tres matrices  $M = U \cdot S \cdot V^\dagger$ , donde  $U$  y  $V$  son ortogonales por derecha, y  $S$  es diagonal no-negativa. Los elementos de  $S$  se dicen los valores singulares de  $M$ . Dada una matriz  $M$  cualquiera, esta descomposición da una forma óptima de aproximarla por una  $M'$  de dimensión menor, minimizando la norma-2 ( $\|\cdot\|^2$ ) de la diferencia  $X := M - M'$ , definida como

$$\|X\|^2 := \text{Tr}(X \cdot X^\dagger) = \sum_{i,j} (X_{i,j})^2$$

La mejor aproximación resulta de ordenar decrecientemente los valores singulares, reordenar consistentemente las filas de  $U$  y columnas de  $V$ , y truncar hasta la dimensión deseada. Naturalmente, el error introducido será menor cuanto más concentrado esté el peso relativo de los valores singulares en un pequeño subconjunto. Esta idea es la base del método DMRG-MPS.

### 2.3.2. Libertad de *gauge* MPS. Canonización y aproximación.

Es fácil notar que las matrices que componen un dado MPS no están unívocamente determinadas: varias elecciones de las  $M_i^{\sigma_i}$ , incluso con las mismas dimensiones, dan lugar al mismo estado. Probablemente la evidencia más clara es la siguiente. Dado un MPS descrito por un cierto conjunto de sitios, puede realizarse el siguiente procedimiento:

1. interpretar  $M_k^{\sigma_k}$  como una matriz  $C(md \times m)$
2. descomponerla como producto de dos matrices  $A(md \times m)$  y  $B(m \times m)$ , de la forma  $C = A \cdot B$
3. interpretar  $M_{k+1}^{\sigma_{k+1}}$  como una matriz  $D(m \times dm)$
4. multiplicarla por izquierda por  $B$ , o sea, calcular  $D' = B \cdot D$
5. reinterpretar  $D'$  como  $d$  matrices de  $m \times m$ , y tomar sus componentes como los nuevos elementos de  $M_{k+1}^{\sigma_{k+1}}$
6. igualmente, reinterpretar  $A$  como  $d$  matrices de  $m \times m$ , y tomar estos valores como los nuevos elementos de  $M_k^{\sigma_k}$ ,

sin que el estado resultante se vea alterado. Esta libertad de *gauge* (medida) permite escoger convenientemente las matrices a usar para describir un dado MPS, imponiendo ciertas condiciones que faciliten las operaciones. En particular, una propiedad que resulta útil mantener en las representaciones MPS, como mostramos más adelante (subsección 2.3.4), es la ortonormalidad por izquierda (resp. derecha) de un sitio MPS, visto como matriz de  $md \times m$  (resp.  $m \times dm$ ).

Una forma conocida de escribir una matriz  $M$  como producto de otras dos, es la llamada descomposición QR:  $M = Q \cdot R$ , donde  $Q$  es ortonormal por izquierda y  $R$  es triangular superior. Un método para conseguir que la segunda matriz involucrada en el producto resulte ortogonal por derecha, puede construirse a partir del anterior de la siguiente forma:

1. calcular la matriz  $(M^\dagger)$  transpuesta de  $M$
2. descomponer  $M^\dagger$  usando QR, o sea, escribirla como  $M^\dagger = Q \cdot R$
3. transponer el resultado, obteniendo  $M = (M^\dagger)^\dagger = (Q \cdot R)^\dagger = R^\dagger \cdot Q^\dagger$

Así, de la ortonormalidad por izquierda de  $Q$ , se deduce la ortonormalidad por derecha de  $Q^\dagger$  buscada. Estos dos procedimientos (QR y su versión por derecha) permiten entonces, dada una representación MPS, transformarla a conveniencia, convirtiendo un cierto sitio MPS en ortogonal por izquierda (resp. derecha), afectando solamente

el vecino por derecha (resp. izquierda). Aplicando consecutivamente estas ortonormalizaciones por izquierda (resp. derecha), partiendo del sitio extremo izquierdo (resp. derecho) y avanzando hasta el  $k - 1$  (resp.  $k + 1$ ), donde  $1 < k < N$ , se obtiene un MPS equivalente cuyos sitios 1 a  $k - 1$  (resp.  $k + 1$  a  $N$ ) son ortonormales por izquierda (resp. derecha). Estos procedimientos se conocen como canonización por izquierda (resp. derecha). La combinación de ambos, resulta en un MPS que se dice canonizado en  $k$ , cuyo sitio  $k$  es el único no-ortonormal, y el resto tienen la ortonormalización correspondiente.

Una vez canonizado un MPS en un cierto  $k$ , puede desplazarse la canonización sin necesidad de realizar nuevamente todo el proceso anterior. Canonizando el sitio  $k$  por izquierda (resp. derecha) usando QR (resp. QR versión por derecha), solo se pierde la canonización de su vecino por derecha (resp. izquierda), quedando canonizado en  $k + 1$  (resp.  $k - 1$ ). Esta operación permite directamente desplazar un lugar la canonización, costando  $O(1)$  en la longitud del MPS. Aplicándola el número de veces necesario, puede transformarse entre cualesquiera dos canonizaciones.

### 2.3.3. Solapamientos de MPS

A partir de los coeficientes del desarrollo de los MPS en la base producto, que resulta de la productoria de las matrices correspondientes

$$S(\vec{\sigma}) = S(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = M_1^{\sigma_1} \cdot \dots \cdot M_N^{\sigma_N}$$

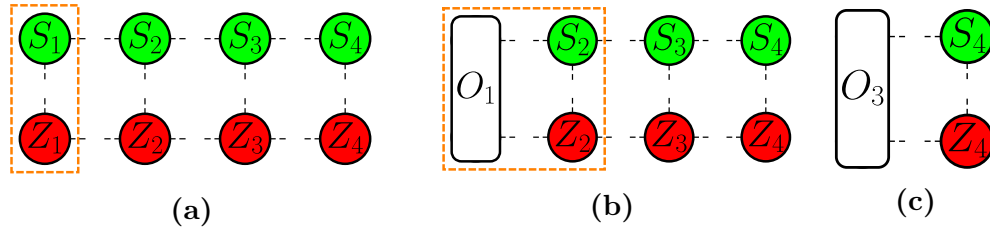
puede calcularse el overlap (producto interno) entre dos MPS  $S$  y  $Z$  como

$$\langle S|Z \rangle = \langle S|I|Z \rangle = \langle S|(\sum_{\vec{\sigma}} |\vec{\sigma}\rangle \langle \vec{\sigma}|)|Z \rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \langle S|\vec{\sigma}\rangle \langle \vec{\sigma}|Z \rangle = \sum_{\vec{\sigma}} S(\vec{\sigma})Z^*(\vec{\sigma})$$

Algorítmicamente esto equivale a realizar todas las multiplicaciones correspondientes, asociando los sitios MPS homólogos y trazando sobre todos los índices virtuales y físicos. Una manera computacionalmente eficiente de hacerlo (figura 2.6), es ir contrayendo sitios entre sí, definiendo nuevos objetos intermedios que agrupen algunas multiplicaciones, calculando sus elementos, para luego poder contraerlos directamente con otros sitios, sin pensar en su estructura interna original. De este modo, se van construyendo objetos cada vez más grandes, que contienen varios de los sitios originales, hasta finalmente contraerlos todos, obteniendo el resultado escalar correspondiente al producto interno.

Un orden natural a usar sería:

1. comenzar por un extremo (sitio 1), definiendo un objeto de partida ( $O_1$ ) contrayendo los primeros sitios correspondientes, trazando sobre el índice físico que los une (figura 2.6a)
2. contraer el próximo par de sitios correspondientes, entre sí y con el objeto anterior, trazando respectivamente sobre el índice físico que los une y sobre los dos índices virtuales que enlazan con  $O_1$ , obteniendo un nuevo objeto  $O_2$ , similar a  $O_1$  (figura 2.6b)
3. continuar iterativamente hasta alcanzar el extremo opuesto (sitio  $N$ )
4. contraer ambos sitios  $N$  entre sí, sobre el índice físico, y con el último objeto  $O_{N-1}$ , sobre los índices virtuales (figura 2.6c)



**Figura 2.6:** Representación gráfica de las contracciones sucesivas a realizar para el cálculo de la proyección (*overlap*) entre dos MPS  $S$  y  $Z$ . Se contrae sobre todos los índices virtuales y físicos, obteniéndose el *overlap* (escalar).

Alternativamente, puede procederse paralelamente en dirección contraria, partiendo del extremo opuesto, de modo que terminen quedando dos objetos finales a contraer entre sí, trazando sobre dos índices virtuales. Es claro que, en ningún caso, el orden operacional seguido altera el resultado final; sin embargo, la eficiencia del cálculo sí puede verse afectada.

La proyección de un MPS sobre un estado  $\vec{\sigma}$  de la base producto puede alternativamente pensarse (más simétricamente) contrayendo también los índices físicos, pero conectando con un MPS que represente al estado  $\vec{\sigma}$ , o sea, un MPS (del mismo tamaño) formado por sitios MPS  $\Sigma_i$ , tales que para cada valor del índice físico  $\lambda_i \in [1, d]$ ,

$$\Sigma_i^{\lambda_i} = \delta_{\lambda_i, \sigma_i} = \begin{cases} 1, & \text{si } \lambda_i = \sigma_i \\ 0, & \text{si } \lambda_i \neq \sigma_i \end{cases} \quad (2.1)$$

son matrices de  $1 \times 1$  (números), de manera que la productoria vale 1 si  $\lambda_i = \sigma_i \forall i \in [1, N]$  y 0 en cualquier otro caso: deltas de Kronecker en los  $\sigma_i$ .

### 2.3.4. Norma de MPS

Un tipo de proyección de particular importancia es la de un estado consigo mismo, dando su norma cuadrada. Y he acá la utilidad de la canonización explicada anteriormente (subsección 2.3.2). Si los estados  $S$  y  $Z$  a proyectar son el mismo, y se describen por un MPS canonizado en  $k$ , el orden operacional conveniente consiste en partir de los extremos izquierdo y derecho paralelamente, e ir contrayendo hasta llegar a los sitios  $k - 1$  y  $k + 1$  respectivamente. La ortonormalidad por izquierda o derecha (según la posición respecto a  $k$ ) de los sitios a contraer, conlleva que estas trazas sean triviales, obteniéndose siempre en los extremos, objetos que representan una delta de Kronecker entre dos índices virtuales. Finalmente las últimas contracciones a realizar son las del sitio  $k$  consigo mismo sobre el índice físico y también sobre los dos índices virtuales, ya que quedan unidos por identidades; resultando en la norma-2 del sitio  $k$ . O sea, la norma de un MPS canonizado, sin importar su longitud, puede simplemente calcularse como la suma de los cuadrados de los elementos del sitio de canonización.

## 2.4. Operadores MPO

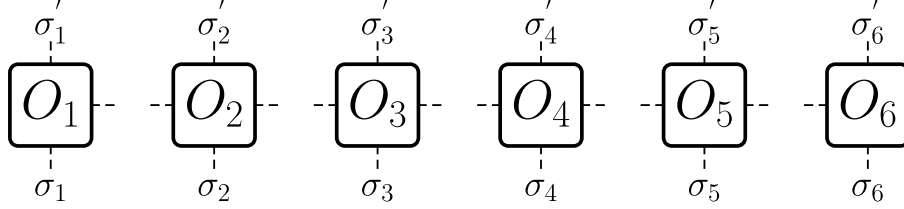
Análogo a los MPS para los estados de un sistema, puede pensarse en objetos similares asociados a operadores. Basta notar que el conjunto de operadores lineales que actúan sobre el espacio de estados de un sistema forman a su vez un espacio de Hilbert. Para un sistema descrito por un espacio de estados de dimensión finita, la dimensión de este espacio de operadores es el cuadrado de la dimensión del espacio de estados. Visto de esta manera, la analogía es directa, permitiendo definir un operador  $\hat{O}$  en forma de MPO (*Matrix-Product Operator*), como un conjunto de objetos (sitios MPO)  $O_i^{\sigma_i, \sigma'_i}$ , tales que los elementos de matriz de  $\hat{O}$  entre dos estados de la base producto pueden calcularse como

$$\langle \vec{\sigma} | \hat{O} | \vec{\sigma}' \rangle = O_1^{\sigma_1, \sigma'_1} \cdot \dots \cdot O_N^{\sigma_N, \sigma'_N} =: O(\vec{\sigma}, \vec{\sigma}')$$

Si la dimensión del espacio de fases de cada subsistema (partícula) es  $d$ , cada sitio MPO es un conjunto de  $d \cdot d = d^2$  matrices de  $m_O \times m_O$ , una asociada a cada par de valores de  $\sigma, \sigma' = 1, \dots, N$ ; donde  $m_O$  es la dimensión del MPO (dimensión de las matrices que componen sus sitios: número de valores posibles de sus índices virtuales). Como para los MPS, si las matrices tuvieran dimensiones diferentes, siempre puede llevarse a esta situación más simétrica, simplemente rellenando con ceros. Igualmente, vale notar que estos  $m_O \cdot d \cdot d \cdot m_O = d^2 \cdot m_O^2$  elementos que componen cada operador de sitio, pueden equivalentemente reagruparse de distintas formas, interpretándolos como matrices o cubos, lo cual puede facilitar el manejo en algunos casos. Considerando



dimensiones  $m_O$  suficientemente grandes, cualquier operador puede escribirse como MPO, y usando descomposición SVD, pueden obtenerse aproximaciones óptimas a MPO de menor dimensión. La figura 2.7 muestra una representación gráfica de un estado MPO.



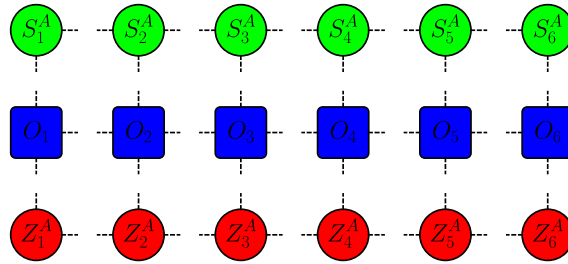
**Figura 2.7:** Representación gráfica de un MPO de 6 sitios.

### 2.4.1. Elementos de matriz de un MPO.

Partiendo de estas definiciones, un elemento de matriz genérico de un MPO  $\hat{O}$  entre dos MPS  $S$  y  $Z$ , puede calcularse directamente como

$$\begin{aligned} \langle S | \hat{O} | Z \rangle &= \langle S | \left( \sum_{\vec{\sigma}} |\vec{\sigma}\rangle \langle \vec{\sigma}| \right) \hat{O} \left( \sum_{\vec{\sigma}'} |\vec{\sigma}'\rangle \langle \vec{\sigma}'| \right) | Z \rangle \\ &= \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} \langle S | \vec{\sigma} \rangle \langle \vec{\sigma} | \hat{O} | \vec{\sigma}' \rangle \langle \vec{\sigma}' | Z \rangle = \sum_{\vec{\sigma}, \vec{\sigma}'} S^*(\vec{\sigma}) O(\vec{\sigma}, \vec{\sigma}') Z(\vec{\sigma}') \quad (2.2) \end{aligned}$$

Similar al cálculo de *overlaps*, esto corresponde a trazar sobre todos los índices físicos y virtuales de todos los objetos involucrados. Pero en este caso es aún más importante realizar las operaciones en orden óptimo, ya que puede influir notablemente en el costo computacional y la capacidad de memoria necesaria. La figura 2.8 muestra una representación gráfica del cálculo de un elemento de matriz de un MPO  $O$  entre dos MPS  $S$  y  $Z$ , para un sistema de tamaño 6.



**Figura 2.8:** Representación gráfica del cálculo de un elemento de matriz de un MPO  $O$  entre dos MPS  $S$  y  $Z$ , para un sistema de tamaño 6. Deben contraerse todos los sitios, trazando sobre todos los índices, obteniendo el valor escalar correspondiente al elemento de matriz del operador  $O$  entre los estados  $S$  y  $Z$ .

## 2.5. Álgebra de MPS/MPO

A fin de poder trabajar con estos sitios MPS y MPO representando estados y operadores de sistemas de varias partículas, es necesario poder realizar sobre ellos operaciones correspondientes a suma, multiplicación y escaleo de los vectores (estados u operadores) que representan. O sea, se deben traducir estas operaciones al espacio de estos objetos, de manera que los argumentos y el resultado de cada función sobre los sitios se correspondan respectivamente con los de la función original actuando en el espacio de estados y operadores. A continuación se verá cómo pueden formularse estas operaciones.

### 2.5.1. Adición de MPS/MPO.

A partir de dos MPS  $S_A$  y  $S_B$ , de dimensiones  $m_A$  y  $m_B$  respectivamente, descriptos por sitios  $A$  y  $B$ , representando dos estados genéricos, puede construirse un nuevo MPS  $S_C$  que describa el estado suma, usando sitios  $C$  de la forma

$$C_i^{\sigma_i}(\Delta, \Gamma) = \begin{cases} A_i^{\sigma_i}(\delta_A, \gamma_A) & , \text{ si } \Delta = \delta_A \in [0, m_A - 1], \Gamma = \gamma_A \in [0, m_A - 1] \\ B_i^{\sigma_i}(\delta_B, \gamma_B) & , \text{ si } \Delta - m_A = \delta_B \in [0, m_B - 1], \Gamma - m_A = \gamma_B \in [0, m_B - 1] \\ 0 & , \text{ en otro caso} \end{cases} \quad (2.3)$$

No es difícil comprobar que esta fórmula ciertamente devuelve un estado que se comporta como la suma de los dos argumentos, en el sentido de que, dado un estado  $\vec{\sigma}$  de la base producto, se verifica la distributividad

$$\langle \vec{\sigma} | S_C \rangle = S_C(\vec{\sigma}) = S_A(\vec{\sigma}) + S_B(\vec{\sigma}) = \langle \vec{\sigma} | S_A \rangle + \langle \vec{\sigma} | S_B \rangle$$

Esto resulta de que, al estar las nuevas matrices formadas por dos bloques diagonales de dimensiones  $m_A$  y  $m_B$ , al multiplicarlas, trazando sobre todos los índices virtuales (los físicos quedan fijados por la proyección), esta forma se mantiene: quedan siempre separadas las contribuciones de cada MPS. La última operación a realizar, es entonces el producto interno entre dos vectores de dimensión  $m_A + m_B$ , correspondiendo las primeras  $m_A$  a los sitios  $A$ , y las últimas  $m_B$ , a los  $B$ . Notar que la dimensión del MPS suma, resulta la suma de las dimensiones de los sumandos:  $m_C = m_A + m_B$ .

La distributividad anterior garantiza que en cualquier cálculo valga la equivalencia  $S_C = S_A + S_B$ . Por ejemplo, puede verse directamente que la proyección sobre un estado

genérico  $Z$  es efectivamente distributiva:

$$\langle Z|S_C \rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \langle Z|\vec{\sigma} \rangle \langle \vec{\sigma}|S_C \rangle = \sum_{\vec{\sigma}} \langle Z|\vec{\sigma} \rangle \langle \vec{\sigma}|S_A \rangle + \sum_{\vec{\sigma}} \langle Z|\vec{\sigma} \rangle \langle \vec{\sigma}|S_B \rangle = \langle Z|S_A \rangle + \langle Z|S_B \rangle$$

Análogamente se puede proceder para adicionar dos MPO  $O_A$  y  $O_B$ , simplemente reemplazando en (2.3) los supraíndices  $\sigma_i$  por índices dobles  $(\sigma_i, \sigma'_i)$ , ya que cada par de valores de estos equivale a un valor de un índice físico en un MPS. Resulta entonces

$$C_i^{\sigma_i, \sigma'_i}(\Delta, \Gamma) = \begin{cases} A_i^{\sigma_i, \sigma'_i}(\delta_A, \gamma_A) & , \text{ si } \Delta = \delta_A \in [0, m_A - 1], \Gamma = \gamma_A \in [0, m_A - 1] \\ B_i^{\sigma_i, \sigma'_i}(\delta_B, \gamma_B) & , \text{ si } \Delta - m_A = \delta_B \in [0, m_B - 1], \Gamma - m_A = \gamma_B \in [0, m_B - 1] \\ 0 & , \text{ en otro caso} \end{cases}$$

que verifica distributividad sobre ambos índices

$$\langle \vec{\sigma}|O_C|\vec{\sigma}' \rangle = O_C(\vec{\sigma}, \vec{\sigma}') = O_A(\vec{\sigma}, \vec{\sigma}') + O_B(\vec{\sigma}, \vec{\sigma}') = \langle \vec{\sigma}|O_A|\vec{\sigma}' \rangle + \langle \vec{\sigma}|O_B|\vec{\sigma}' \rangle$$

### 2.5.2. Multiplicación de MPO.

En muchos casos, son de interés operadores compuestos a partir de adiciones y multiplicaciones de ciertos operadores elementales, bastante más sencillos. Esta adición corresponde a la suma como vectores en el espacio de operadores, analizada anteriormente. La multiplicación, en general no-conmutativa, se refiere a la concatenación usual: la aplicación consecutiva de los operadores factores. Así como para la adición, en el caso de la multiplicación existe también un procedimiento que toma dos MPO representando operadores cualesquiera  $O_A$  y  $O_B$ , y devuelve un nuevo MPO correspondiente al operador producto  $O_C = O_A \cdot O_B$ . En este caso, los nuevos sitios  $C_i$  están dados por

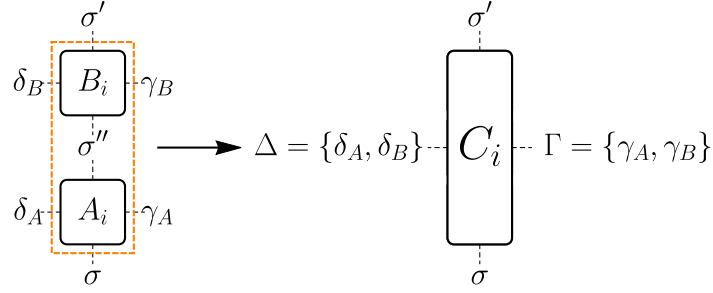
$$C_i^{\sigma_i, \sigma'_i}(\Delta = \{\delta_A, \delta_B\}, \Gamma = \{\gamma_A, \gamma_B\}) = \sum_{\sigma''_i} A_i^{\sigma_i, \sigma''_i}(\delta_A, \gamma_A) \cdot B_i^{\sigma''_i, \sigma'_i}(\delta_B, \gamma_B) ,$$

donde el índice doble  $\Delta$  (resp.  $\Gamma$ ) toma cada combinación  $\{\delta_A, \delta_B\}$  (resp.  $\{\gamma_A, \gamma_B\}$ ). Una manera natural de organizar estos valores es usar uno de los índices (digamos que el de  $A$ ) como “lento” y el otro (en este caso, el de  $B$ ) como “rápido”, o sea:

$$\Delta^{i,j} = \{\delta_A^i, \delta_B^j\} =: \Delta^{i \cdot m_B + j}, i \in [0, m_A - 1], j \in [0, m_B - 1] \implies i \cdot m_B + j \in [0, m_A \cdot m_B - 1] ,$$

y equivalentemente para  $\Gamma$ . Independientemente del orden usado para contar estos nuevos índices, el hecho es que la dimensión del MPO producto, resulta el producto de

las dimensiones de los factores:  $m_C = m_A \cdot m_B$ . Para una implementación concreta, sí es importante usar el mismo orden para todos los sitios, de manera que eventualmente las contracciones a realizar sobre los nuevos índices virtuales  $\Delta$  o  $\Gamma$ , correspondan a trazas sobre mismos pares de índices originales  $\{\delta_A, \delta_B\}$  o  $\{\gamma_A, \gamma_B\}$ . La figura 2.9 muestra una representación gráfica de la construcción de los operadores de sitio  $C_i$  contrayendo  $A_i$  y  $B_i$  sobre el índice físico que los une.



**Figura 2.9:** Representación gráfica de la multiplicación de dos sitios MPS  $A_i$  y  $B_i$ , contrayendo sobre el índice físico que los une ( $\sigma''$ ), para construir el nuevo sitio  $C_i$  del MPO  $C = A \cdot B$ .

### 2.5.3. Escaleo de MPS/MPO.

Otra operación que interesa saber realizar en el lenguaje de estos objetos, es la multiplicación (*scaling*) de un MPS  $S$  por un escalar  $\alpha$ , devolviendo la representación del estado  $S' = \alpha \cdot S$ . Puede verse que cualquier remplazo

$$S_i \rightarrow \alpha_i \cdot S_i := S'_i \quad \forall i, \text{ tal que } \prod_i \alpha_i = \alpha$$

tiene el resultado deseado: para todo  $|\vec{\sigma}\rangle$  de la base producto, se verifica la asociatividad

$$\langle \vec{\sigma} | S' \rangle = S'(\vec{\sigma}) = \prod_i S'_i{}^{\sigma_i} = \prod_i \alpha_i \cdot S_i{}^{\sigma_i} = \left( \prod_i \alpha_i \right) \cdot \left( \prod_i S_i{}^{\sigma_i} \right) = \alpha \cdot S(\vec{\sigma}) = \alpha \langle \vec{\sigma} | S \rangle$$

Igual que antes, esto hace que en cualquier cálculo (de *overlaps* o elementos de matriz) para el nuevo MPS  $S'$ , valga la identidad  $S' = \alpha \cdot S$ . Como para la adición, este procedimiento puede extenderse a MPO, reemplazando  $\sigma_i$  por  $(\sigma_i, \sigma'_i)$ .

Así, partiendo solamente de las representaciones MPO de operadores elementales, típicamente sencillas, y aplicando los procedimientos anteriores para combinarlos, pueden construirse MPO correspondientes a operadores bastante más complejos, de forma automática. Un ejemplo, central en este trabajo, es el operador hamiltoniano de un sistema de partículas interactuantes, que típicamente se compone de sumas de términos asociados a las energías individuales de las partículas, más términos que describen los distintos tipos de interacción entre ellas.

## 2.6. Método DMRG-MPS

Antes de presentar el algoritmo, vale remarcar la importancia conceptual de lo anterior, en dos ideas fundamentales. Por un lado, los MPS de una dada dimensión  $m$ , son estados “especiales” que pueden ser descriptos por un conjunto de coeficientes cuyo tamaño crece linealmente con el número de partículas del sistema, en contraste con el crecimiento exponencial de la dimensión del espacio de Hilbert completo. Por otra parte, cualquier estado puede ser representado por un MPS de cierta dimensión; y la descomposición SVD ofrece una forma óptima de reducir la dimensión de un MPS, minimizando la norma-2 de la diferencia entre los estados correspondientes al MPS original y la aproximación resultante. Consecuentemente, esto minimiza la diferencia entre sus valores de expectación, en particular, entre sus energías. Combinando estos resultados, puede estudiarse, de manera aproximada, el espectro de energías de un sistema, restringiendo el análisis a un pequeño subespacio del espacio de fases, que crece linealmente con el número de partículas, siendo computacionalmente tratable. Lo realmente notorio es que esta aproximación es considerablemente buena para estados fundamentales de muchos sistemas de interés, lo cual puede comprenderse mediante conceptos de información cuántica y entropía de entrelazamiento, discutidos en [10].

Sobre esta base, el método DMRG-MPS consiste esencialmente en, dado un MPO  $H$  representando el hamiltoniano de un sistema, encontrar dentro del conjunto  $S(m)$  de los MPS de una dimensión  $m$  dada, aquel  $S_0$  que minimiza el valor de expectación de  $H$ , o sea,

$$\langle S_0 | H | S_0 \rangle = \min_{S \in S(m)} \langle S | H | S \rangle$$

Si bien el tamaño del conjunto de coeficientes crece solo linealmente (no exponencialmente) con el número de partículas, típicamente es aún demasiado grande como para que sean aplicables técnicas convencionales de minimización en espacios multidimensionales. En lugar de esto, el procedimiento seguido se basa en minimizar sucesivamente sobre los elementos de cada sitio, manteniendo en cada caso el resto de los sitios invariantes. La convergencia de tal método, más aún al mínimo global del espacio de parámetros, es ciertamente una cuestión nada trivial. La motivación, sin embargo, viene del simple hecho de que, al aplicarse sobre un MPS  $S_0$  correspondiente a un mínimo, éste permanecería invariante: no podría encontrarse ningún cambio que disminuya  $\langle S_0 | H | S_0 \rangle$ , menos aún al restringirse a cambios locales. La implicación inversa, sin embargo, no se verifica: un estado  $S'$  puede comportarse como “mínimo” considerando solo estas variaciones individuales de un sitio a la vez, sin realmente ser el mínimo ( $S_0$ ) del espacio de parámetros, ya que pueden ser necesarias variaciones conjuntas de múltiples sitios para llevar de  $S'$  a  $S_0$  sin atravesar máximos locales. Para lidiar con este problema, que dificulta la convergencia, los programas usados implementan ope-

raciones intercaladas en que se perturba aleatoriamente la convergencia, para evitar estancamiento en estos mínimos efectivos locales.

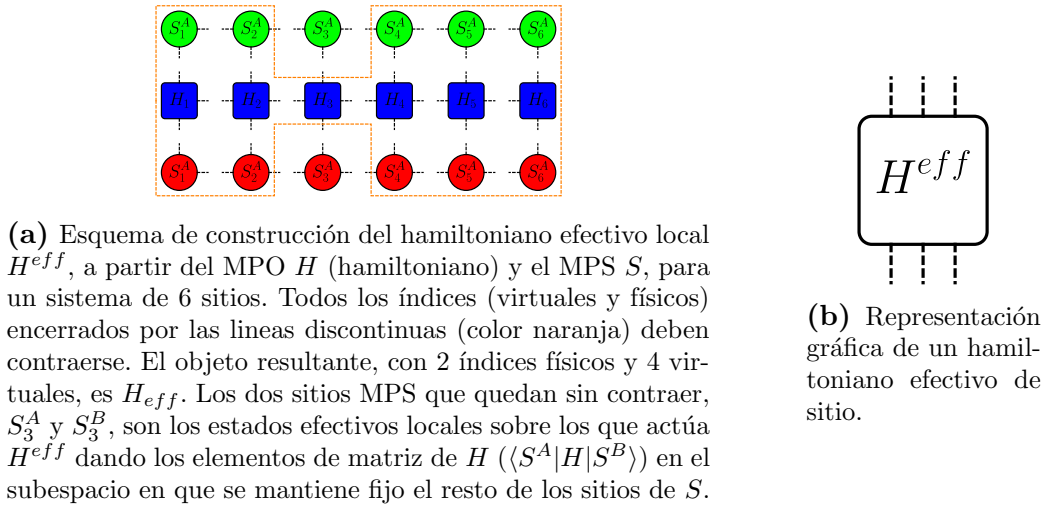
### 2.6.1. Hamiltoniano efectivo local.

Dado un MPS  $S$ , analizando los estados locales  $S_i$  de un sitio  $i$ , manteniendo el resto fijo, puede construirse (figura 2.10a), a partir del resto de los sitios y  $H$ , un hamiltoniano efectivo local  $H_i^{eff}$ , que permita calcular elementos de matriz de  $H$  dentro de ese subespacio (donde los sitios  $S_{j \neq i}$  se mantienen fijos). Para ello, basta considerar elementos de matriz  $\langle S^A | H | S^B \rangle$ , donde  $S_j^A = S_j^B = S_j \forall j \neq i$ , y notar que las operaciones necesarias para este cálculo pueden realizarse en el siguiente orden. Puede trazarse primero sobre todos los índices que conectan sitios invariantes ( $H_j \forall j$  y  $S_{j \neq i}^{A,B}$ ), y finalmente contraer el objeto resultante de todas estas multiplicaciones, con los sitios  $S_i^A$  y  $S_i^B$ . Así, solo estas últimas operaciones varían al cambiar el par  $(S_i^A, S_i^B)$ . Basta entonces calcular una vez el objeto resultante de todas las anteriores, y usarse el mismo resultado para cada par de sitios. Este objeto (figura 2.10) es precisamente el  $H_i^{eff}$  buscado: puede pensarse como un operador que, actuando sobre un  $S_i^B$ , devuelve un  $S_i^A$  resultante de contraerlos sobre los tres índices que los conectan (dos virtuales y uno físico), que es luego proyectado contra  $S_i^A$ , trazando sobre los tres índices restantes (dos virtuales y uno físico), para obtener  $\langle S^A | H | S^B \rangle$ . La acción de  $H_i^{eff}$  sobre los  $S_i$  es lineal, ya que resulta de una composición de multiplicaciones de matrices. El problema de hallar el  $S_i$  que minimice  $\langle S | H | S \rangle$  fijados el resto de los sitios, se reduce entonces a encontrar

$$\min_{S_i} \langle S_i | H_i^{eff} | S_i \rangle$$

Esto es, hallar el “estado” (efectivo) fundamental de  $H_i^{eff}$ , para lo cual existen herramientas muy eficientes. Sin embargo, queda una cuestión importante a tener en cuenta: la normalización.

Es necesario imponer una condición de normalización sobre los estados permitidos en este método variacional, ya que de lo contrario siempre puede hacerse que  $\langle S | H | S \rangle$  tome cualquier valor, con solo escalar los elementos de  $S$  por el factor apropiado, lo cual no tiene sentido físico. Tomando la condición usual de norma unitaria  $\langle S | S \rangle = 1$ , debe entonces imponerse la restricción  $\sum_{\vec{\sigma}} S^*(\vec{\sigma}) S(\vec{\sigma}) = 1$ , a los MPS sobre los que se pretende minimizar. Sin embargo, en el problema efectivo local planteado para  $H_i^{eff}$ , una condición más natural a considerar sería simplemente la de norma 1 del estado (efectivo) local  $S_i$ , ya que es la implementada por los métodos convencionales usados para resolver problemas de autovalores. Esto en principio dificultaría el problema, ya que usar la condición  $\langle S | S \rangle = 1$  impone restricciones que involucran objetos aparte de  $H_i^{eff}$  y los estados de sitio. La buena noticia es que, dado un MPS  $S$  y un sitio  $i$ , se tiene



**Figura 2.10:** Operador hamiltoniano efectivo de un sitio.

una representación en que ambas condiciones son equivalentes: su forma canónica. La libertad de *gauge* antes mostrada, permite hacer concordar estas dos normalizaciones, simplemente llevando a  $S$  a su forma canónica en  $i$ .

Esto muestra que la minimización de  $\langle S | H | S \rangle$  respecto de  $S_i$  (fijos el resto de los sitios de  $S$ ), para  $S$  canonizado en  $i$ , puede realizarse hallando el estado fundamental del operador efectivo local  $H_i^{eff}$  resultante. Para esto, se tiene una amplia variedad de técnicas optimizadas para distintos casos. Una particularmente eficiente, a la vez que sencilla de implementar, aplicable sobre operadores hermíticos, como es el caso para  $H_i^{eff}$ , es el método de Lanczos [13] [37]. Este consiste en partir de un vector aleatorio, y generar una nueva base (de Krylov [38]) aplicando sucesivamente el operador sobre el último vector generado, y ortonormalizando en cada paso con los vectores anteriores. Diagonalizar la forma matricial del operador en la base original, equivale a diagonalizar la matriz de este cambio de base, que resulta tridiagonal, siendo menos costoso. Lo que lo hace realmente útil, es que en muchos casos de interés, ni siquiera es necesario generar la base de Krylov entera (completar la matriz tridiagonal): con solo unos pocos elementos (comparado con la dimensión del operador), el autovalor maximal (mínimo o máximo) de la matriz parcial generada (operador reducido en el subespacio de Krylov) converge rápidamente al valor que se obtendría del cálculo completo. Elegir un vector inicial “cercano” al estado fundamental mejora notablemente la convergencia de Lanczos: disminuye la cantidad de elementos necesarios a calcular de la matriz tridiagonal. Es por ello que los programas usados en este trabajo, implementan una versión de este método, Lanczos Modificado, que consiste en generar un subespacio de Krylov (KS) de dimensión relativamente baja, encontrar el estado fundamental dentro de este KS, repetir el método usando éste como vector inicial, y así iterativamente. Esto reduce las operaciones necesarias para conseguir la convergencia, típicamente alcanzada en el orden de 100 repeticiones de Lanczos.

Una manera alternativa de entender lo anterior resulta de minimizar el valor de expectación de  $H$  respecto de  $S_i$ , usando un multiplicador de Lagrange  $\lambda$  para fijar la normalización. O sea, debe minimizarse la función de Lagrange

$$L(S_i, \lambda) = \langle S|H|S \rangle - \lambda(\langle S|S \rangle - 1)$$

respecto de  $\lambda$  y  $S_i$ , manteniendo los  $S_{j \neq i}$  fijos. Para  $S$  canonizado en  $i$ ,

$$L(S_i, \lambda) = \langle S_i|H_i^{eff}|S_i \rangle - \lambda(\langle S_i|S_i \rangle - 1)$$

La minimización respecto de  $\lambda$  implica  $\langle S_i|S_i \rangle = 1$ , que garantiza la norma unitaria de  $S$ . Igualando a 0 la derivada respecto de  $\langle S_i|$ , se llega a un problema de autovalores para  $H_i^{eff}$ ,

$$H_i^{eff} |S_i \rangle = \lambda |S_i \rangle ,$$

cuya solución de menor autovalor corresponde al mínimo de  $L(S_i, \lambda)$  buscado.

### 2.6.2. Algoritmo implementado.

Sobre estas ideas, el algoritmo de DMRG usado en este trabajo puede describirse como:

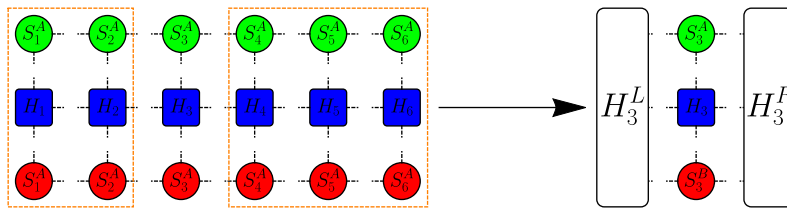
1. construir un MPO de longitud igual al número de partículas del sistema, que represente el hamiltoniano  $H$  de interés
  - a) construir los distintos MPO asociados a los operadores elementales que componen  $H$ , típicamente reducible a operadores de una partícula
  - b) combinarlos para obtener un MPO correspondiente a  $H$ , usando los procedimientos de adición, multiplicación y escaleo
  - c) opcionalmente, truncarlo a una cierta dimensión  $m_H$ , usando SVD
2. generar un MPS aleatorio  $S$  de la misma longitud, y de cierta dimensión  $m$ , como propuesta inicial
3. minimizar sucesivamente respecto de cada sitio  $S_i$ , en forma cíclica ( $i = 1, 2, \dots, N-1, N, N-1, \dots, 2, 1, 2, \dots$ ), manteniendo en cada caso el resto de los sitios invariantes
  - a) canonizar en el sitio  $i$
  - b) construir el hamiltoniano efectivo local  $H_i^{eff}$
  - c) aplicar Lanczos (modificado), partiendo del  $S_i$  actual, y remplazarlo por el “estado” (efectivo) fundamental convergido



4. calcular  $\langle S|H|S \rangle$  luego de cada *loop* (cada vez que  $i = 1$ ), terminar cuando el módulo de la diferencia entre los dos últimos valores obtenidos sea menor que un cierto criterio de convergencia

Una cuestión que este método de DMRG (de la forma planteada) no observa, es el hecho de que las canonizaciones realizadas antes de cada minimización (paso 3a), producen cambios en otros sitios. Esto ciertamente podría afectar la convergencia de modo no trivial; pero de vuelta, la idea de base es que, aplicado sobre un verdadero MPS mínimo, este permanecería invariante. Por otro lado, la elección de escoger los  $i$  cíclicamente, pretende precisamente reducir estos cambios en otros sitios al canonizar, ya que solo se afecta el sitio vecino, el de la canonización anterior. Además, este orden es ventajoso también desde el punto de vista del costo computacional, ya que hace que sea necesario canonizar un solo sitio en cada paso.

Un detalle no menor, que reduce el costo computacional de los programas usados, es el hecho de que el método de Lanczos no requiere de conocer explícitamente los elementos de matriz de  $H_i^{eff}$ , sino solamente saber aplicarlo sobre un estado efectivo local  $S_i$ . Esto a primera impresión puede no parecer significativo, pero el costo de calcular explícitamente este operador efectivo, usando el procedimiento explicado (la definición), resulta orden  $O(m_S^4)$ , ya que tiene cuatro índices virtuales, cada uno de dimensión  $m_S$  (además de los dos índices físicos, de dimensión  $d$ ). Sin embargo, existe una vía alternativa para computar el resultado de  $H_i^{eff} |S_i\rangle$  sin nunca llegar a construir realmente  $H_i^{eff}$ , costando solo  $\sim m_S^3$ . La estrategia (figura 2.11) consiste en no contraer sobre el operador de sitio  $H_i$ , sino mantenerlo aislado, y contraer por separado todos los sitios MPS y MPO a su izquierda y derecha, construyendo dos nuevos objetos:  $H_i^L$  y  $H_i^R$ , respectivamente, ambos con dos índices virtuales MPS. La ventaja de hacer esto radica en que puede construirse un procedimiento que tome  $S_i$  y estos tres objetos,  $H_i^L$ ,  $H_i^{eff}$  y  $H_i^R$ , calculados una vez para cada paso DMRG-MPS (cada canonización), y calcule  $H_i^{eff} |S_i\rangle$  realizando las contracciones restantes en orden tal que nunca se construyan objetos con cuatro índices virtuales (de dimensión  $m_S$ ), costando solo  $\sim m_S^3$ . Un orden de contracciones que consigue esto es: primero  $H_i^L$  con  $H_i^{eff}$ , luego  $H_i^R$  con  $S_i$ , y finalmente los dos resultados de las anteriores entre sí.



**Figura 2.11:** Representación gráfica de la contracción de todos los sitios a la izquierda y derecha del sitio  $i$ , construyendo los objetos  $H_i^L$  y  $H_i^R$  respectivamente, usados para computar  $H_i^{eff} |S_i\rangle$ , costando  $\sim m_S^3$ .

En resumen, este método DMRG-MPS da la forma óptima para aproximar variacionalmente un estado (*target*) de un sistema de muchas partículas. Comparaciones de rendimiento (*performance*) con otros métodos pueden ser encontrados en [10]. El código central de los programas usados para este trabajo, fue desarrollado por Yuriel Núñez Fernández durante su trabajo de Tesis de Doctorado en Física en el Instituto Balseiro. En su informe [39], el autor hace un análisis detallado de los programas implementados en cuanto uso de memoria y costo en tiempo computacional, que crecen como  $O(L \cdot m_S^2)$  y  $O(L \cdot m_S^3)$  respectivamente, donde  $L$  es el tamaño de los MPS usados y  $m_S$  su dimensión. En este trabajo, adaptamos este código base para aplicarlo al sistema estudiado. Además, desarrollamos códigos independientes, para contrastar resultados, y comprender mejor los detalles de funcionamiento del método.

## 2.7. Uso en materia condensada

En principio, este método así planteado, ya sea en su versión tradicional o MPS, no es aplicable a sistemas de partículas indistinguibles: no observa condiciones de simetría de intercambio en los estados. Sin embargo, puede adaptarse a este caso aparentemente tan diferente, con solo una reinterpretación de los conceptos de partícula y estado. Usando la idea de segunda cuantización, se intercambian estos roles: se piensa en los estados de una partícula como subsistemas distinguibles entre sí, cuyas configuraciones están dadas por su número de ocupación (0 incluido). Los distintos estados del sistema se corresponden entonces a las diferentes combinaciones de estas ocupaciones. Esto permite incluso considerar situaciones en que el número total de partículas no necesariamente permanezca constante.

Por supuesto, en la práctica, típicamente son estos los sistemas de interés: sistemas de muchas partículas idénticas interactuantes. Ejemplos concretos, de diferentes naturalezas, pueden encontrarse en diversas áreas de la física: nuclear, atómica, molecular, y especialmente, materia condensada. El origen del potencial responsable de las interacciones, así como la forma de los estados de una partícula, y el tipo de partículas en sí, pueden diferir entre estos casos, pero son todos ejemplos de estos sistemas. Los sitios MPS a considerar para describirlos estarían entonces dados por estos estados de una partícula. No necesariamente un sitio MPS por cada uno, lo importante es que la productoria de los números de configuraciones posibles de los estados de partícula se corresponda a la dimensión del espacio de Hilbert del sistema. Por ejemplo, un estado de partícula que soporte las 4 configuraciones (ocupaciones): 0 partículas, 1 partícula con proyección de espín *up* o *down*, y 2 partículas con proyecciones opuestas, puede alternativamente pensarse como combinación de 2 sitios, asociados a los espines *up* y *down* respectivamente, cada uno con dos configuraciones disponibles: vacío y ocupado, ya que generan el mismo espacio de fases.

El caso de los sólidos es particularmente complejo, ya que el número de electrones involucrados en una muestra macroscópica es del orden de  $10^{23}$ , y la localización, en espacio e impulso, de estos electrones puede ser bastante complicada. Existen dos situaciones extremas en que se tienen modelos relativamente sencillos que logran describir con buena precisión las observaciones: electrones itinerantes (de Bloch), y electrones localizados; y no mucho se conoce sobre la zona intermedia.

El enfoque de Bloch consiste en resolver el problema (ecuación de Schrödinger) para un solo electrón en el potencial dado por la estructura cristalina del material, obtener sus autoestados (continuos en energía) dados por una cierta relación de dispersión  $E(\vec{k})$  (base de Bloch), y suponer que al ir agregando electrones, simplemente se van ocupando sucesivamente los niveles de energía cada vez mayor, siguiendo el principio de exclusión de Pauli. Existen luego correcciones interactuantes a este modelo, que apuntan a incluir perturbativamente las interacciones entre electrones: se supone que sigue siendo válida la base de Bloch (sigue generando el espacio de fases de sistema), y se consideran elementos de matriz (perturbativos) asociados a la interacción entre dos electrones en cada par de estados de Bloch.

Los modelos de electrones localizados, tipo Hubbard y Anderson, proponen electrones cuyas funciones de onda se encuentran concentradas en pequeñas regiones espaciales alrededor de los núcleos atómicos. O sea, al arreglar los átomos en el cristal, sus electrones no se ven demasiado afectados, si bien pueden desplazarse sobre la red: se continúan usando las bases originales de autoestados de un átomo, y la base producto resultante, para expandir los estados del sistema, como se verá más adelante. Análogamente, para incluir (perturbativamente) las interacciones en modelos localizados, se calculan los elementos de matriz de interacción entre pares de orbitales atómicos.

El modelo de Bloch funciona bastante bien para algunos sistemas, llamados *Fermi Liquids* [40], en los que las interacciones entre los electrones de conducción (deslocalizados) pueden pensarse como renormalizaciones de sus parámetros (carga y masa), pudiendo describirse la dinámica en términos de cuasipartículas (electrones “vestidos”) débilmente interactuantes. Los modelos localizados, son útiles para el estudio de sólidos, cuyos electrones de valencia (*core*) ocupan regiones espaciales pequeñas alrededor de los núcleos, en comparación con las distancias interatómicas, de manera que interactúan poco entre sí. Sin embargo, en los llamados materiales fuertemente correlacionados, son precisamente estas interacciones las que rigen el comportamiento, haciendo que estos modelos no sean aplicables eficientemente. Son estas situaciones, en que se requiere tener en cuenta las interacciones entre electrones, donde métodos numéricos como DMRG son realmente valiosos.

## 2.8. Aplicación concreta al modelo de Kanamori-Hubbard

En este trabajo, aplicamos el método DMRG-MPS explicado (sección 2.6), a un modelo KH (descrito en la sección 1.1) de tamaño  $L = 12$  (salvo para el análisis de tamaño presentado en la sección 4.6), o sea formado por  $L$  de estos sitios de dos orbitales. Para esto, consideramos representaciones MPS y MPO de tamaño  $L \cdot 2 \cdot 2 = 4 \cdot L$  ( $4 \cdot L$  sitios MPS), ya que un electrón puede encontrarse en cualquiera de los  $L$  sitios de la red, en el orbital 1 o 2, y con proyección de espín *up* o *down* (Figura 1.2). Cada sitio MPS (o MPO) corresponde entonces a un cierto estado de una partícula, o sea, una cierta combinación de sitio de la cadena, orbital y espín.

### 2.8.1. Interpretaciones de sitio MPS alternativas

Como explicábamos antes (Sección 2.7), existen otras variantes para elegir qué interpretar como sitio y, consecuentemente, qué configuraciones considerar para cada uno. Por ejemplo, podríamos directamente tomar como un sitio MPS cada sitio de la red (sitio físico), los cuales tienen disponibles  $2^4 = 16$  configuraciones, sin embargo, puede comprobarse fácilmente que esta interpretación de sitios “grandes” incrementa el costo computacional.

Cabe mencionar también que, en abstracción de las nociones físicas sobre los significados de las configuraciones en la interpretación usada, existen maneras alternativas de descomponer el espacio de dimensión 16 de estos sitios “grandes” como producto tensorial de 4 espacios de sitios de 2 configuraciones, similares a los usados. Estas descomposiciones serían, en principio, igualmente eficientes, si se tratara con MPO arbitrarios. Sin embargo, dado que el hamiltoniano estudiado se compone de operadores que actúan sobre orbitales y proyecciones de espín bien definidos, cambiando su ocupación (creando y destruyendo partículas), la interpretación elegida reduce las dimensiones MPO. Descomposiciones alternativas harían que estos operadores elementales resulten combinaciones lineales de operadores de sitios, en lugar de ser directamente un operador de sitio cada uno, como sucede para la elección usada.

### 2.8.2. Orden MPS

Similarmente ocurre con el ordenamiento de los sitios MPS (dada la interpretación de sitios usada): pueden pensarse varias maneras “naturales” de ordenar estos  $4 \cdot L$  sitios MPS. Quizás la más inmediata de proponer es agruparlos por sitio físico, o sea, los cuatro correspondientes a un dado  $i$  en el hamiltoniano KH, luego los siguientes cuatro que correspondan a  $i + 1$ , y así sucesivamente, con algún sub-orden interno que

se repita en cada grupo para las partes de orbital y proyección de espín. La Figura (2.12a) muestra un esquema de este ordenamiento, que llamamos POS (de posición-orbital-espín), para un sistema de  $L = 4$  sitios físicos ( $4 \cdot 2 \cdot 2 = 16$  sitios MPS). Análogamente, podría tomarse como orden principal el orbital, y como suborden la combinación de espín e índice ( $i$ ) en la red. A esta segunda variante (Figura 2.12b) nos referimos como OSP (de orbital-espín-posición).

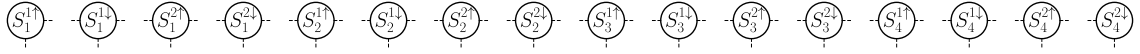
Sin embargo, estos órdenes no resultan eficaces, quizás debido a que conectan mediante hopping (usando POS) o interacción coulombiana (usando OSP), sitios MPS distantes, haciendo que la entropía de entrelazamiento crezca rápidamente con el tamaño del sistema, afectando la eficiencia de DMRG [41]. La falta de precisión de los resultados obtenidos al usar estos órdenes, la podemos notar directamente en los llenados por orbital y espín de los estados fundamentales a que convergen los algoritmos usados, que no cumplen con las simetrías físicas del sistema, como explicamos a continuación que sí ocurre con el orden que usamos para los cálculos centrales de este trabajo. Asimismo, comparando con resultados verificados usando Diagonalización Exacta (ED) [42], pudimos notar características erróneas en densidades de estados calculadas usando estos órdenes, en particular, falsos gaps en  $\omega = 0$ .

Con el objetivo de corregir estos problemas de simetría en los estados fundamentales, que presentan los órdenes POS y OSP, probamos las siguientes variantes. En cada caso, mantener inalterado el orden principal y la primera mitad de los sitios MPS, e invertir ambos subórdenes en la segunda mitad. Así, POS y OSP dan lugar respectivamente a POSSYM (Figura 2.12c) y OSPSYM (Figura 2.12d). De esta forma, el orden POSSYM (resp. OSPSYM) hace corresponder la simetría de reflexión (resp. de orbital), propia del sistema físico, con la simetría de reflexión (matemática) del *ansatz* MPS, con lo cual mejoramos la convergencia de los algoritmos usados. Sin embargo, en los resultados obtenidos mediante POSSYM y OSPSYM aún detectamos problemas de precisión, que pudimos resolver usando el orden explicado a continuación. Notar que, si bien POSSYM (resp. OSPSYM) fuerza la simetría de reflexión (resp. orbital), el resto queda libre, permitiendo desbalances en las poblaciones por orbital y polarización.

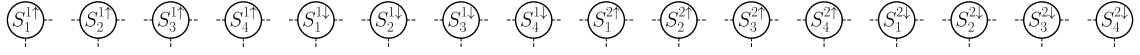
Luego de experimentar usando varios órdenes para los sitios MPS, adoptamos el que se muestra en la Figura 2.13, que llamamos CROSS, ya que fue el que arrojó mejores resultados para el sistema estudiado. Como mostramos, este orden consiste en una variación del OSP, en que los sitios MPS correspondientes al primer orbital (primera mitad) se mantienen inalterados, mientras que aquellos correspondientes al otro orbital (segunda mitad) se rearreglan invirtiendo solo el suborden asociado al sitio físico en la red (manteniendo el orden de espín). Queda así en correspondencia la reflexión MPS con la simetría conjunta de cambio de orbital e inversión de espín, propia del sistema físico, mejorando significativamente la convergencia.

El resultado práctico de esto es que garantiza que el estado fundamental al que converge nuestro método de DMRG cumple con esta simetría. En particular, las ocupaciones globales de las 4 cadenas de orbital-espín verifican las relaciones  $N_{1,\uparrow} = N_{2,\downarrow}$  y  $N_{1,\downarrow} = N_{2,\uparrow}$ , que implican las igualdades en las ocupaciones totales por orbital  $N_1 = N_{1,\uparrow} + N_{1,\downarrow} = N_{2,\downarrow} + N_{2,\uparrow} = N_2$  y espín  $N_\uparrow = N_{1,\uparrow} + N_{2,\uparrow} = N_{2,\downarrow} + N_{1,\downarrow} = N_\downarrow$ , que efectivamente se corresponden con simetrías del hamiltoniano que deben cumplirse por tanto en el estado fundamental del sistema.

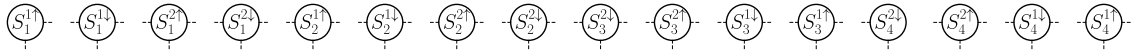
Por completitud, en la sección 4.5 presentamos un análisis detallado comparando resultados obtenidos usando órdenes MPS alternativos, y explicamos la superioridad del orden CROSS seleccionado.



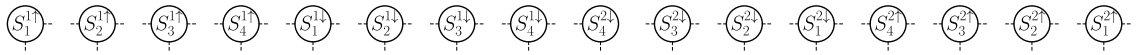
(a) POS



(b) OSP

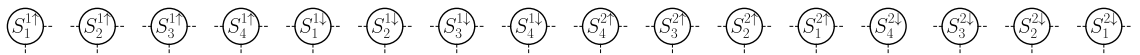


(c) POSSYM



(d) OSPSYM

**Figura 2.12:** Representaciones MPS de un modelo KH de  $L = 4$  sitios físicos (ver Figura 1.2), arreglando los sitios MPS  $S_i^{\alpha\sigma}$  siguiendo cuatro posibles órdenes (no usados para los cálculos centrales de este trabajo, solo en la Sección 4.5 a modo de comparación). El subíndice  $i$  indica el sitio físico en la red, y los supraíndices  $\alpha$  y  $\sigma$  representan orbital y espín respectivamente.



**Figura 2.13:** Sitios MPS en un modelo KH de  $L = 4$  sitios físicos, siguiendo el orden CROSS, usado en este trabajo para maximizar la eficiencia de DMRG-MPS. El subíndice  $i$  indica el sitio físico en la red, y los supraíndices  $\alpha$  y  $\sigma$ , representan orbital y espín respectivamente.

# Capítulo 3

## Propiedades dinámicas

Para el estudio de propiedades dinámicas, usamos algoritmos que aplican los métodos de Vector Corrección (CV) [43] y Lanczos para el cálculo de funciones de Green a temperatura cero. Luego, la densidad de estados de una partícula (DOS) la calculamos en cada caso a partir de la parte imaginaria de la función de Green de crear y destruir un electrón en el mismo sitio, sobre el estado fundamental (de energía  $E_0$ ), sumando las contribuciones de cada una de las cuatro combinaciones de orbital y espín. Por ejemplo, la contribución del orbital  $\alpha = 1$  con proyección  $|\uparrow\rangle$ , corresponde a

$$A_{1\uparrow}(\omega) = A_{1\uparrow}^>(\omega) + A_{1\uparrow}^<(-\omega) \text{ , donde}$$
$$A_{1\uparrow}^>(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle c_{1\uparrow}(\omega + i\eta - H + E_0)^{-1} c_{1\uparrow}^\dagger \rangle \text{ y } A_{1\uparrow}^<(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle c_{1\uparrow}^\dagger(\omega + i\eta - H + E_0)^{-1} c_{1\uparrow} \rangle$$

En un sistema finito, la densidad de estados desocupados es una suma de deltas de Kroenecker centradas en las energías (de excitación) de los autoestados (discretos) en el subespacio de  $n + 1$  partículas, relativo a la energía del estado fundamental, con  $n$  partículas. Por tanto, para capturar la forma de esta DOS en el límite termodinámico, agregamos a la energía  $\omega$  esta parte imaginaria  $i\eta$ , para lograr un ensanchamiento lorentziano de las funciones delta. Luego de experimentar con varios valores, elegimos usar  $\eta = 0,15$ , ya que es lo suficientemente grande como para obtener curvas suaves (como se observaría en el límite termodinámico), a la vez que lo suficientemente pequeño como para no perder detalles de las densidades de estados.

El costo de computar la inversión del operador  $(\omega + i\eta + E_0 - H)$  para calcular los elementos de matriz en  $A^>$  y  $A^<$ , crece cúbicamente con la dimensión del hamiltoniano, que a su vez aumenta exponencialmente con el tamaño del sistema. Sin embargo, este cálculo no es realmente necesario: solo se requiere conocer el vector (complejo)

$$|V(z := \omega + i\eta)\rangle := \frac{1}{\omega + i\eta + E_0 - H} c^+ |0\rangle \text{ ,}$$

llamado Vector Corrección (CV), donde  $|0\rangle$  representa el estado fundamental. En el resto de los cálculos a continuación, asumimos por simplicidad  $E_0 = 0$ . Para el caso general ( $E_0 \neq 0$ ), solo debe hacerse el remplazo  $\omega \rightarrow (\omega + E_0)$ .

Separando explícitamente las partes real e imaginaria de  $|V(z)\rangle$ , obtenemos

$$|V^R(z)\rangle + i|V^I(z)\rangle = |V(z)\rangle = \frac{1}{\omega + i\eta - H} c^+ |0\rangle = \frac{(\omega - H) - i\eta}{(\omega - H)^2 + \eta^2} c^+ |0\rangle \quad (3.1)$$

que conduce a dos ecuaciones reales, una para cada parte:

$$[(\omega - H)^2 + \eta^2] |V^I(z)\rangle = -\eta c^+ |0\rangle \quad (3.2)$$

$$|V^R(z)\rangle = \frac{(\omega - H)}{(\omega - H)^2 + \eta^2} c^+ |0\rangle = -\frac{(\omega - H)}{\eta} |V^I(z)\rangle \quad (3.3)$$

Así, la primera relación (3.2) permite hallar  $|V^I(z)\rangle$  resolviendo el problema lineal

$$T \cdot |X\rangle = |Z\rangle, \text{ para } T = [(\omega - H)^2 + \eta^2], \quad |Z\rangle = -\eta c^+ |0\rangle, \quad (3.4)$$

para luego obtener  $|V^R(z)\rangle$  directamente de  $|V^I(z)\rangle$  usando (3.3). Finalmente,

$$A(\omega + i\eta) = \langle 0 | c | V(z) \rangle$$

Análogamente a lo explicado en la subsección 2.6.2 para el cálculo de estados fundamentales mediante DMRG, la solución de (3.4) corresponde a encontrar el MPS  $X_0$  que minimiza la función

$$L(X) = \langle X | T | X \rangle - \langle X | Z \rangle - \langle Z | X \rangle, \text{ ya que}$$

$$\frac{\delta L}{\delta \langle X |} = 0 \implies T \cdot |X\rangle = |Z\rangle$$

Para hallar este  $X_0$  procedemos de manera similar que antes: partimos de una propuesta inicial aleatoria y minimizamos  $L(X)$  sucesivamente respecto de cada sitio MPS  $X_i$ , fijado el resto. De esta forma, para cada sitio  $i$ , la función local a minimizar resulta

$$L(X_i) = \langle X_i | T_i^{eff} | X_i \rangle - \langle X_i | Z_i^{eff} \rangle - \langle Z_i^{eff} | X_i \rangle,$$

donde  $T_i^{eff}$  (resp.  $Z_i^{eff}$ ) representa un sitio MPS (resp. MPO) efectivo, construido contrayendo los sitios fijados, y  $X_i$  es el vector efectivo local sobre el cual se debe minimizar  $L$ . Esto nos lleva nuevamente a un problema efectivo para  $X_i$ :

$$T_i^{eff} \cdot X_i = Z_i^{eff} \quad (3.5)$$



Este problema local es también lineal, ya que las contracciones que definen los objetos involucrados son siempre operaciones lineales. Para solucionar (3.5) utilizamos un método similar a Lanczos Modificado, que consiste en resolver aproximadamente dentro de un subespacio de Krylov (KS) de baja dimensión (respecto del espacio de Hilbert), y repetir este proceso reutilizando la última solución obtenida, como punto de partida para generar el KS en la siguiente iteración. Análogamente a lo explicado para Lanczos en 2.6.2, este método no requiere de conocer explícitamente una representación matricial de  $T_i^{eff}$ , sino solamente saber aplicar este operador sobre un dado vector efectivo local  $X_i^{eff}$ , permitiendo también la optimización a orden  $O(m^3)$ .

Una dificultad que presenta este método, así planteado, es que conlleva computar  $H^2$ , cuya dimensión MPO es  $m_H^2$ , aumentando significativamente el costo computacional. Para lidiar con este problema, hacemos la siguiente aproximación. En lugar de usar  $H$  para construir el MPO  $A$  y luego con éste generar  $T_i^{eff}$  (como debería procederse), construimos  $H_i^{eff}$  y aproximamos directamente

$$T_i^{eff} \approx [(\omega - H_i^{eff})^2 + \eta^2] \quad (3.6)$$

Esta aproximación ha sido ampliamente utilizada de manera eficiente en diversos problemas [44], motivada por el hecho de que para el caso (teórico) en que se trabaje con MPS que representen exactamente (sin truncar mediante SVD) los estados del sistema, ambas definiciones de  $T_i^{eff}$  serían equivalentes. En la práctica, por supuesto, al usar MPS truncados, la calidad de la aproximación dada por (3.6) dependerá del sistema particular estudiado ( $H$ ).

Para los resultados presentados en este trabajo, hemos considerado estados MPS formados por matrices de dimensión hasta  $m_{gs} = 1024$  en el cálculo de estados fundamentales mediante DMRG. Para el cálculo de funciones espectrales mediante DMRG-CV, usamos dimensiones  $m_{dyn} = 256$ . Estos parámetros están esencialmente determinados por los recursos computacionales disponibles y la precisión de los resultados.

### 3.1. Cálculo de excitaciones Doblón-Holón

Una característica fundamental de este modelo, es la presencia de estas excitaciones colectivas, que llamamos Doblón-Holón (HD), que han sido detectadas numéricamente usando DMFT [24] [1] [45] [46]. La formación de estos estados de muchos cuerpos (Figura 1.2) puede entenderse de la siguiente manera, en una aproximación local de un sitio (de dos orbitales), despreciando las contribuciones de energía cinética. La configuración de sitio más probable en el estado fundamental del sistema semilleno ( $\mu = 0$ ), es aquella en que ambos orbitales se encuentran simplemente ocupados (representada como  $|1, 1\rangle$ , un electrón por orbital), ya que es la de mínima energía (Tabla 3.1).

Si el orbital  $\alpha = 2$  en el sitio  $i$  se encuentra simplemente ocupado, al agregarle otro electrón (de proyección opuesta al ya existente), se forma un sitio (de orbital) doblemente ocupado (doblón), y pueden ocurrir dos situaciones. La primera (más probable) es que el sitio correspondiente (mismo  $i$ ) en el orbital  $\alpha = 1$  esté simplemente ocupado, en cuyo caso se forma el estado  $|1, 2\rangle$ . En esta aproximación, la energía de cada estado resulta de sumar las contribuciones de cada interacción (intra- e inter-orbital), y la energía de sitio ( $\epsilon - \mu = \epsilon = -\frac{U}{2} - V$ ). Para  $J = 0$  y  $\mu = 0$ , la energía de estos estados localizados puede entonces calcularse como:

$$E = E^{intra} + E^{inter} + E^{sitio}$$

$$E_{|1,1\rangle} = 0 + V + n_i(\epsilon - \mu) = 0 + V + 2(-\frac{U}{2} - V) = -U - V \quad (3.7)$$

$$E_{|1,2\rangle} = U + 2V + n_i(\epsilon - \mu) = U + 2V + 3(-\frac{U}{2} - V) = -V - \frac{U}{2}$$

De modo que la diferencia de energía que resulta, corresponde a una excitación en la banda de Hubbard superior (UHB).

$$\Delta E = E_{|1,2\rangle} - E_{|1,1\rangle} = \frac{U}{2} \quad (3.8)$$

La segunda posibilidad es que el orbital  $\alpha = 1$  del sitio  $i$  estuviera vacío (holón), resultando en el estado excitado  $|0, 2\rangle$ , que llamamos excitación doblón-holón.

$$E_{|0,2\rangle} = U + 0 + n_i(\epsilon - \mu) = U - 2(\frac{U}{2} + V) = -2V \quad (3.9)$$

Se interpreta entonces este incremento (respecto de  $|1, 1\rangle$ ) como la energía de la excitación HD.

$$\Delta E = E_{|0,2\rangle} - E_{|1,1\rangle} = U - V =: \Delta \quad (3.10)$$

La Tabla 3.1, extraída de [1], muestra, en aproximación local, las energías de cada configuración atómica, relativo a la configuración  $|1, 1\rangle$ , para el caso general incluyendo acoplamiento de Hund ( $J$ ) y potencial químico ( $\mu$ ). Estos resultados nos resultan útiles para contrastar con los cálculos mediante DMRG presentados en Cap. 4. Presentamos solo los valores para estos estados representativos, invirtiendo las proyecciones de espín se obtienen estados equivalentes con igual energía.

Para estudiar la dinámica de una excitación colectiva localizada, calculamos la función respuesta de crear (resp. destruir) un electrón, y luego destruirlo (resp. crearlo) proyectando antes sobre el estado de sitio de la configuración atómica correspondiente. Esto es, definimos (siguiendo la nomenclatura usada en [1]) las funciones de Green

$$A_{s_1, s_2}(\omega) = A_{s_1, s_2}^>(\omega) + A_{s_1, s_2}^<(-\omega), \text{ con} \quad (3.11)$$

$$A_{s_1, s_2}^>(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle X_{s_1, s_2}(\omega + i\eta - H + E_0)^{-1} c_{1\uparrow}^\dagger \rangle \quad y$$

$$A_{s_1, s_2}^<(\omega) = -\frac{1}{\pi} \Im \langle X_{s_1, s_2}^\dagger(\omega + i\eta - H + E_0)^{-1} c_{1\uparrow} \rangle ,$$

donde los operadores

$$X_{s_1, s_2}^\dagger = P_{s_1, s_2} c_{1\uparrow}^\dagger \quad y \quad X_{s_1, s_2} = c_{1\uparrow} P_{s_1, s_2} \quad (3.12)$$

son, respectivamente, las excitaciones directa y reversa, siendo  $P_{s_1, s_2} = |s_1, s_2\rangle\langle s_1, s_2|$  el proyector sobre la configuración atómica  $|s_1, s_2\rangle$ , y los valores de expectación se toman sobre el estado fundamental ( $|0\rangle$ ).

Configuraciones atómicas $ s_1, s_2\rangle$	$\epsilon_{ s_1, s_2\rangle}$
$ 0, 0\rangle$	$U + V + 2\mu$
$ \uparrow, 0\rangle$	$\frac{U}{2} + \frac{J}{2} + \mu$
$ \uparrow, \uparrow\rangle$	0
$ \uparrow, \downarrow\rangle \pm  \downarrow, \uparrow\rangle$	$J \mp J$
$ 0, \uparrow\downarrow\rangle \pm  \downarrow\uparrow, 0\rangle$	$U - V + J \mp J$
$ \uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$	$\frac{U}{2} + \frac{J}{2} - \mu$

**Tabla 3.1:** Energía de cada configuración atómica, en aproximación local. Extraído de [1].

De esta forma, solo sumamos los pesos correspondientes a los procesos en que al crear (resp. destruir) un electrón, se crea (resp. destruye) la excitación  $|s_1, s_2\rangle$ . Por ejemplo, el operador

$$X_{\uparrow\downarrow, 0}^\dagger = n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} (1 - n_{2\uparrow}) (1 - n_{2\downarrow}) c_{1\uparrow}^\dagger$$

corresponde a la formación de un par de electrones en el mismo sitio y orbital, con proyecciones de espín contrarias (doblón), creando un electrón en el orbital  $\alpha$ , si este estaba simplemente ocupado y  $\bar{\alpha}$  vacío (holón), o sea, creando una cuasipartícula doblón-holón (HD). Usamos entonces  $X_{\uparrow\downarrow, 0}^\dagger$  para calcular las contribuciones  $A_{\uparrow\downarrow, 0}^\dagger(\omega)$  de la excitación HD (ver sección 3.1) en las densidades de estados (DOS) dadas por  $A(\omega)$ . Comprobamos así la presencia de estas cuasipartículas en los sistemas estudiados, y observamos en detalle su comportamiento dinámico.



# Capítulo 4

## Resultados

En este capítulo presentaremos los principales resultados obtenidos en este trabajo de tesis. Los valores de  $A(\omega)$  se grafican en unidades adimensionales arbitrarias, y  $\omega$  tiene las mismas unidades de energía que los parámetros  $t_\alpha$ ,  $U$ ,  $V$ , y  $J$  en el hamiltoniano (1.1). El nivel de Fermi corresponde siempre a  $\omega = 0$ .

Los resultados centrales de este trabajo fueron calculados para sistemas de  $L = 12$  sitios (salvo el análisis de tamaño que presentamos en la sección 4.6) con condiciones de contorno abiertas (excepto la comparación con condiciones periódicas mostrada en la sección 4.7) e interacción intra-orital  $U = 4$ , mediante DMRG (sección 2.6.2) usando el orden CROSS (Figura 2.13) para las representaciones MPS (salvo la comparación con órdenes alternativos en la sección 4.5).

### 4.1. Modelo KH sin interacción de Hund ( $J = 0$ )

Durante la primera parte de este trabajo, estudiamos el caso particular del modelo KH sin acoplamiento de Hund ( $J = 0$ ), o sea, equivalente a dos cadenas de Hubbard paralelas que interactúan solo mediante repulsión coulombiana local entre electrones en un mismo sitio de la red.

#### 4.1.1. Bandas de diferente ancho ( $t_1 \neq t_2$ )

En sistemas con bandas de diferente ancho, o sea, con valores diferentes para los parámetros de hopping ( $t_1 \neq t_2$ ), observamos que en el rango de valores de  $\mu$  en que solo el orbital de mayor  $t$  (orbital ancho) es dopado (fase de Mott Selectiva en Orbital, OSM [23]), aparecen en las densidades de estados, picos característicos a energías positivas (respecto del nivel de Fermi), que han sido previamente asociados a excitaciones tipo HD. El hecho de que estos resultados hayan podido reproducirse mediante DMRG, sin recurrir a aproximaciones locales tipo DMFT, es importante, ya que indica que no se

trata de un efecto de aproximación de campo medio. Todos los cálculos que presentamos en esta subsección corresponden a sistemas con  $t_1 = 0,5$  y  $t_2 = 0,25$ .

Con el objetivo de comprobar que realmente se trata de estas cuasipartículas, y analizar cuantitativamente su efecto en la dinámica de estos sistemas, calculamos en cada caso las funciones respuesta correspondientes a la excitación HD, para así comparar con la densidad de estados. Esto es, usamos los operadores  $X_{s_1,s_2}$  y  $X_{s_1,s_2}^\dagger$  (3.12) para analizar las funciones de Green de procesos en que al crear (resp. destruir) un electrón, se crea (resp. destruye) una de estas excitaciones. En el primer caso lo que sucede es que se crea el electrón faltante en sitios en la configuración atómica  $|1,0\rangle$ , llevándolo a la  $|2,0\rangle$ . Análogamente, en el segundo proceso, se parte de un estado con el sitio en la configuración atómica  $|2,0\rangle$ , llevándolo a la  $|1,0\rangle$  al destruir un electrón.

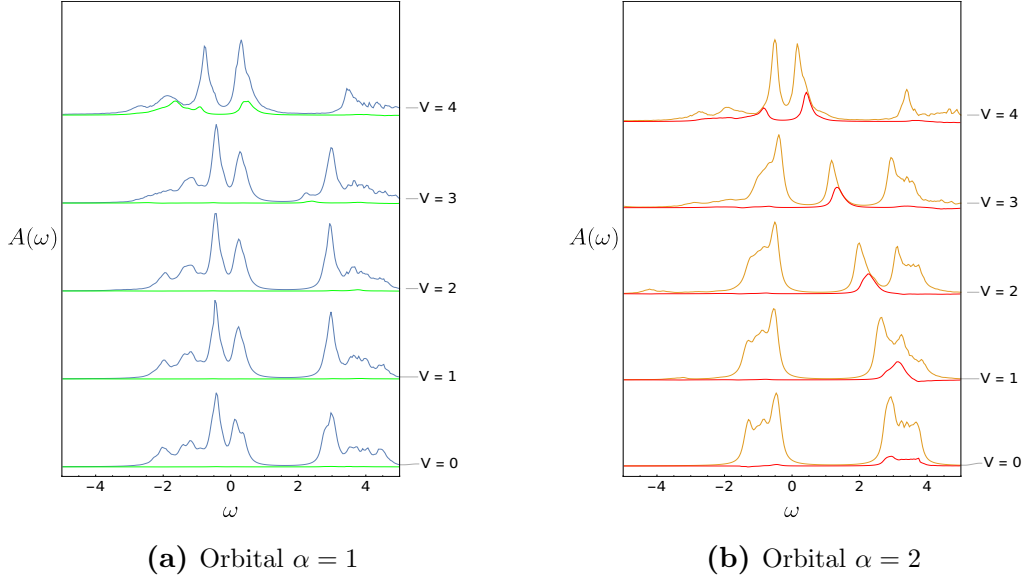
Dado que estas excitaciones colectivas que involucran partículas en ambos orbitales, se deben a las fuertes correlaciones generadas por la presencia de interacciones inter-orbitales, es fundamental entender cómo cambian sus pesos en la DOS al variar el parámetro  $V$  en el hamiltoniano. La Figura 4.1 muestra un caso representativo en que se puede apreciar cómo esta interacción inter-orbital modifica las bandas de Hubbard en la DOS (curvas azul y naranja), de forma que parte del peso de la UHB (centrada en  $\omega \approx 3$ ) queda separado en un pico de menor energía, correspondiente a la excitación HD. Se observa que al aumentar  $V$ , la energía característica de estos picos de HD disminuye, se acerca al nivel de Fermi, consistente con el mecanismo local explicado anteriormente para el cálculo de  $\Delta$  (Sección 3.1).

Según este mecanismo con que explicamos la formación de estas excitaciones HD, estos picos no deberían desplazarse en energía al variar el potencial químico. Sin embargo, la Figura 4.2 muestra que al dopar el sistema con huecos, la energía característica de estas excitaciones aumenta. Esto puede entenderse a partir de las energías relativas de las distintas configuraciones de sitios (Tabla 3.1). Para  $\mu < -\frac{U}{2} = -2$ , el estado atómico de menor energía cambia de  $|1,1\rangle$  a  $|1,0\rangle$ . Además, sabemos que el mecanismo propuesto se basa en una aproximación local, donde estamos despreciando contribuciones de energía cinética, que es de esperar que tengan peso importante en las densidades de estados.

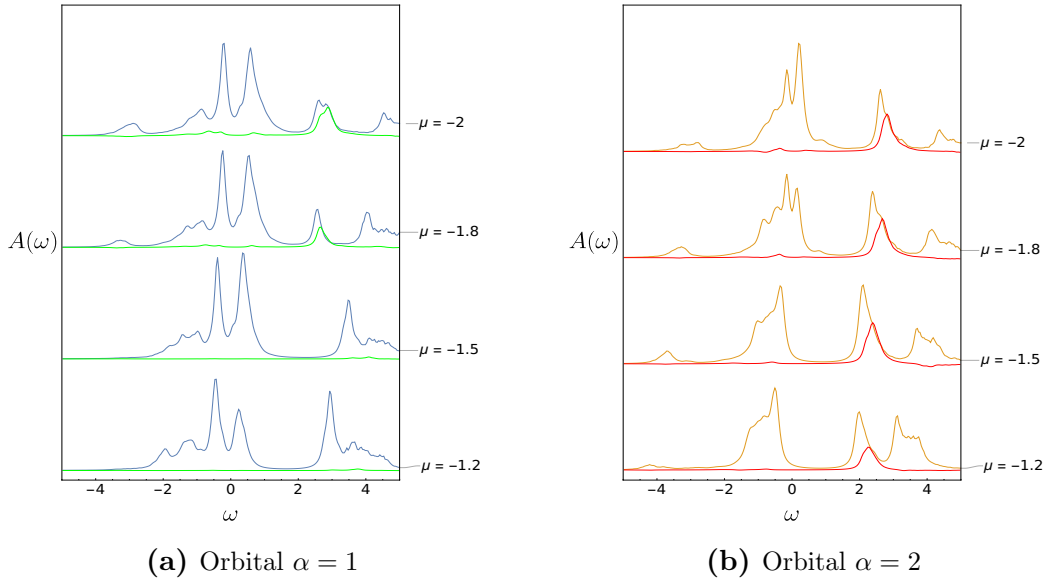
Las curvas verdes (resp. rojas) en las Figuras 4.1 y 4.2, corresponden al cálculo de esta función espectral en el orbital  $\alpha = 1$  (resp.  $\alpha = 2$ ) de un sistema KH con bandas de diferente ancho. Observamos que la respuesta dinámica de estas excitaciones se corresponden con los picos observados entre ambas bandas de Hubbard en la DOS del orbital angosto ( $\alpha = 2$ ).

Para  $\mu = -1,2$  y  $\mu = -1,5$ , donde el sistema se encuentra en la fase de Mott selectiva en orbital ( $\alpha = 1$  es metal y  $\alpha = 2$  aislante), la excitación HD para  $\alpha = 2$  (roja) tiene peso importante en este pico entre bandas, mientras que para  $\alpha = 1$  (verde) es nula. Para  $\mu \leq -1,8$ , al volverse metal también  $\alpha = 2$ , aparece un pico similar en

la DOS de  $\alpha = 1$ , y correspondientemente para su excitación HD. Esto es un fuerte indicador de que efectivamente dichas excitaciones son las responsables de los picos observados en la DOS de un orbital al estar el otro dopado con huecos, o sea, en fase metálica.



**Figura 4.1:** Densidad de estados (azul y naranja) y funciones espectrales de la excitación HD (verde y rojo), separadas por orbital, para distintos valores de la interacción inter-orbital, en un sistema KH con bandas de diferente ancho.  $L = 12$ ,  $t_1 = 0,5$ ,  $t_2 = 0,25$ ,  $U = 4$ ,  $J = 0$ ,  $\mu = -1,2$ .



**Figura 4.2:** Densidad de estados (azul y naranja) y funciones espectrales de la excitación HD (verde y rojo), separadas por orbital, en función del potencial químico, en un sistema KH con bandas de diferente ancho.  $L = 12$ ,  $t_1 = 0,5$ ,  $t_2 = 0,25$ ,  $U = 4$ ,  $V = 2$ ,  $J = 0$ .

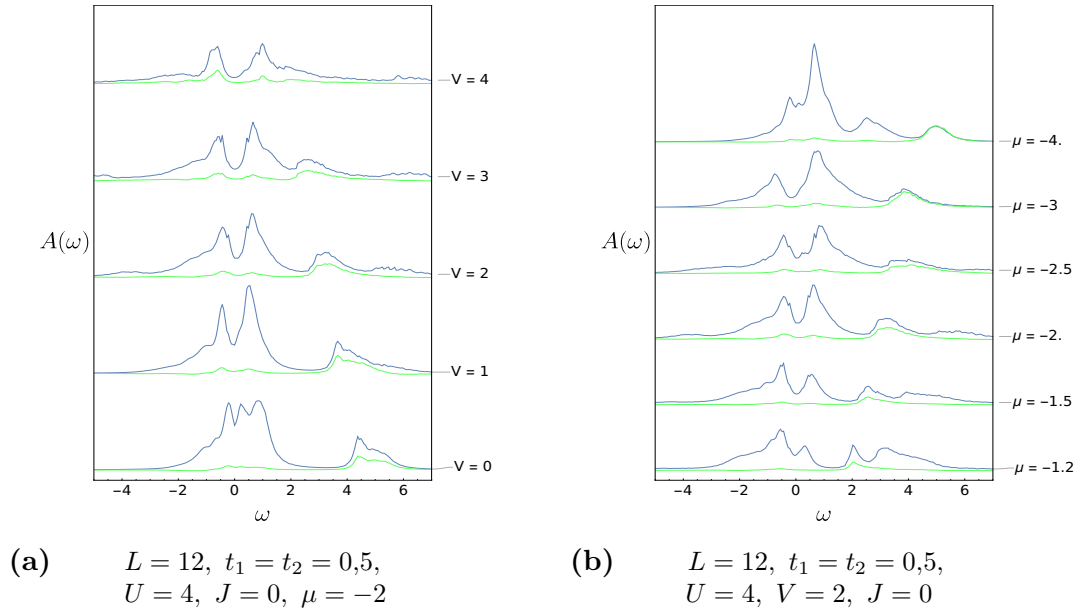
Este resultado es consistente con la correlación observada en [24] (mediante DMFT en una red cuadrada, usando DMRG como resolutor de impureza) entre densidad de estados finita en la energía de Fermi en una banda y surgimiento de estados inter-banda

de cuasipartículas HD bien definidos a energías de excitación  $\Delta = U - V$  en la otra. En el caso simétrico  $U = V$ , los picos de cuasipartícula están localizados en el nivel de Fermi, llevando a una transición de Mott continua simultánea.

#### 4.1.2. Bandas iguales ( $t_1 = t_2$ )

En sistemas de bandas iguales ( $t_1 = t_2$ ), pudimos también identificar excitaciones HD. Este resultado es de especial importancia ya que, al ser equivalentes ambos orbitales, no tienen lugar transiciones OSMT, con lo cual comprobamos que no es necesario que ocurra una transición tal, para la formación de estas excitaciones, como se menciona en [47]. Todos los cálculos que presentamos para bandas iguales, corresponden a sistemas con  $t_1 = t_2 = 0,5$ . En cada caso, graficamos solo el orbital  $\alpha = 1$ , ya que ambos son equivalentes.

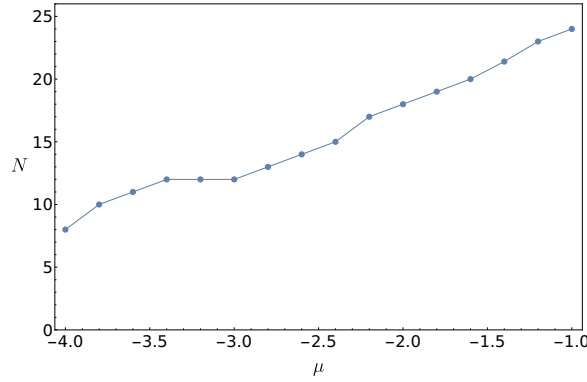
La Figura 4.3a muestra igualmente cómo el aumento en la intensidad de la interacción inter-orbital  $V$  modifica el pico HD, separándolo de la UHB. Al dopar el sistema con huecos (Figura 4.3b), el pico HD en la densidad de estados se desplaza hacia energías positivas. Observamos que la curva de la función respuesta de esta excitación reproduce cada vez mejor la forma de este pico en la densidad de estado, siendo prácticamente exacto el resultado para  $\mu = -4$ . Creemos que esto puede deberse a una disminución en la ocupación de sitios en la configuración  $|1, 1\rangle$ , ya que deja de ser la de menor energía (en aproximación atómica), haciendo que las excitaciones HD que se creen no interfieran entre sí, y su dinámica sea más coherente.



**Figura 4.3:** Densidad de estados (azul) y función espectral de la excitación HD (verde), en un sistema KH de bandas iguales, para distintos valores de la interacción inter-orbital (a), y en función del potencial químico (b). Se grafica solo el orbital  $\alpha = 1$ , ya que ambos son equivalentes. Se observa la UHB alrededor de  $\omega \approx 5$ .



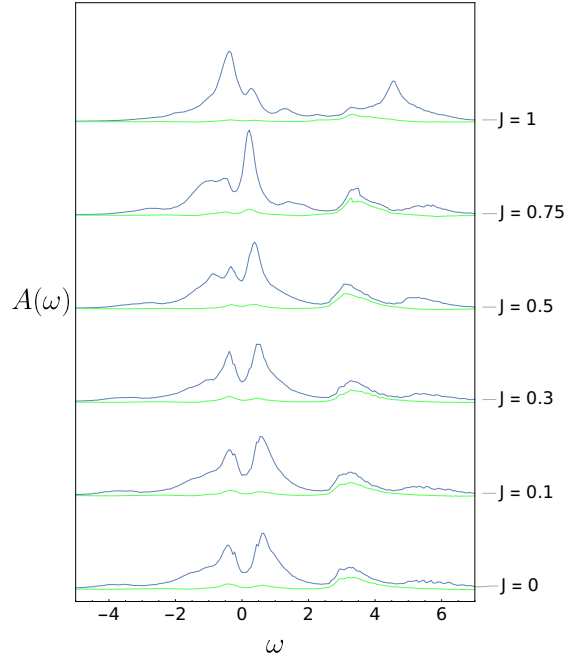
La disminución de amplitud (*dip*) que observamos en la DOS en el nivel de Fermi, podría indicar la presencia de un gap de excitaciones alrededor de  $\omega = 0$ . Pero al realizar un barrido en  $\mu$  (Figura 4.4), variando el dopaje de huecos, no detectamos plateau en  $\mu = -2$  en las curvas de ocupación ( $N$ ) vs  $\mu$ . También podrían aparecer *dips* de esta forma debido falta de estados cerca del nivel de Fermi, por efecto de tamaño finito, y no reflejar el comportamiento en el límite termodinámico. Sin embargo, como mostraremos más adelante (Sección 4.6), no apreciamos tampoco cambios significativos en estos *dips* al calcular para sistemas de distinto tamaño. Basados en estos resultados, creemos que se trata de una característica real de estas DOS, pero que no corresponde a un gap de excitaciones. No obstante, para tener evidencia sólida que nos permita confirmar este resultado, sería necesario realizar cálculos para sistemas de mayor tamaño con buena precisión.



**Figura 4.4:** Ocupaciones  $N$  vs  $\mu$  para un sistema KH de bandas iguales  $L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $U = 4$ ,  $V = 2$ ,  $J = 0$ .

## 4.2. Modelo KH con interacción de Hund ( $J \neq 0$ )

Hemos estudiado cómo afecta la densidad de estado, y particularmente la banda HD, la inclusión de un acoplamiento de Hund en sistemas con interacciones intra- e inter-orbital. Observamos que en presencia del acoplamiento de Hund la DOS cambia de estructura. La banda HD se ensancha, aunque no distinguimos una separación clara con  $J$  como muestran en [1]. Este ensanchamiento puede entenderse a partir de las energías de las configuraciones en el límite atómico mostradas en la Tabla 3.1. Del hamiltoniano KH (1.1) vemos que las interacciones de energía  $J$  realizan fluctuaciones de espín entre orbitales, y mezclan los niveles de HD, mediante el término de hopping de pares, resultando en un ensanchamiento de la DOS en las excitaciones con mayor componente de estos estados.



**Figura 4.5:** Densidad de estados (azul) y función espectral de la excitación HD (verde), en un sistema KH de bandas iguales, para distintos valores de la acoplamiento de Hund.

$L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $U = 4$ ,  $V = 2$ ,  $\mu = -2$ . Se observa la UHB alrededor de  $\omega \approx 5$ .

### 4.3. Caracterización de las excitaciones

Además de la cuasipartícula HD, estudiamos también la presencia de excitaciones colectivas locales similares, mediante funciones de Green de la forma (3.11), análogamente proyectando los operadores de un electrón ( $c_i$ ) sobre el subespacio correspondiente cada configuración atómica. De esta forma, analizamos las respuestas de los siguientes operadores:

$$X_{\uparrow\downarrow,0}^\dagger = n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}(1 - n_{2\uparrow})(1 - n_{2\downarrow})c_{1\uparrow}^\dagger \quad (4.1)$$

$$X_{\uparrow,0}^\dagger = n_{1\uparrow}(1 - n_{1\downarrow})(1 - n_{2\uparrow})(1 - n_{2\downarrow})c_{1\uparrow}^\dagger \quad (4.2)$$

$$X_{\uparrow\downarrow,\uparrow}^\dagger = n_{1\uparrow}n_{1\downarrow}n_{2\uparrow}(1 - n_{2\downarrow})c_{1\uparrow}^\dagger \quad (4.3)$$

$$X_{\uparrow,\uparrow}^\dagger = n_{1\uparrow}(1 - n_{1\downarrow})n_{2\uparrow}(1 - n_{2\downarrow})c_{1\uparrow}^\dagger \quad (4.4)$$

Por ejemplo, el operador 4.4 corresponde a la formación de un par de electrones en el mismo sitio y distinto orbital, creando un electrón en el orbital  $\alpha$ , si este estaba desocupado y  $\bar{\alpha}$  simplemente ocupado. Como explicamos en la sección 3.1, estos son estados representantes, invirtiendo las proyecciones de espín se obtienen estados equivalentes con igual energía (ver Tabla 3.1).

Las Figuras 4.6 combinan la densidades de estados, y las funciones respuesta de las excitaciones  $|\uparrow\downarrow, 0\rangle$ ,  $|\uparrow, 0\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$ ,  $|\uparrow, \uparrow\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$  y  $|\uparrow, \downarrow\rangle$ , para sistemas KH de bandas iguales, en varias configuraciones de parámetros representativas. Esto nos permite identificar en cada caso a qué tipo de excitaciones se debe cada característica de la DOS. En los casos con  $J = 0$ , graficamos solamente las curvas correspondientes a las sumas

$$A_{|\uparrow,1\rangle} := A_{|\uparrow,\uparrow\rangle} + A_{|\uparrow,\downarrow\rangle} = 2A_{|\uparrow,\uparrow\rangle} \text{ y} \quad (4.5)$$

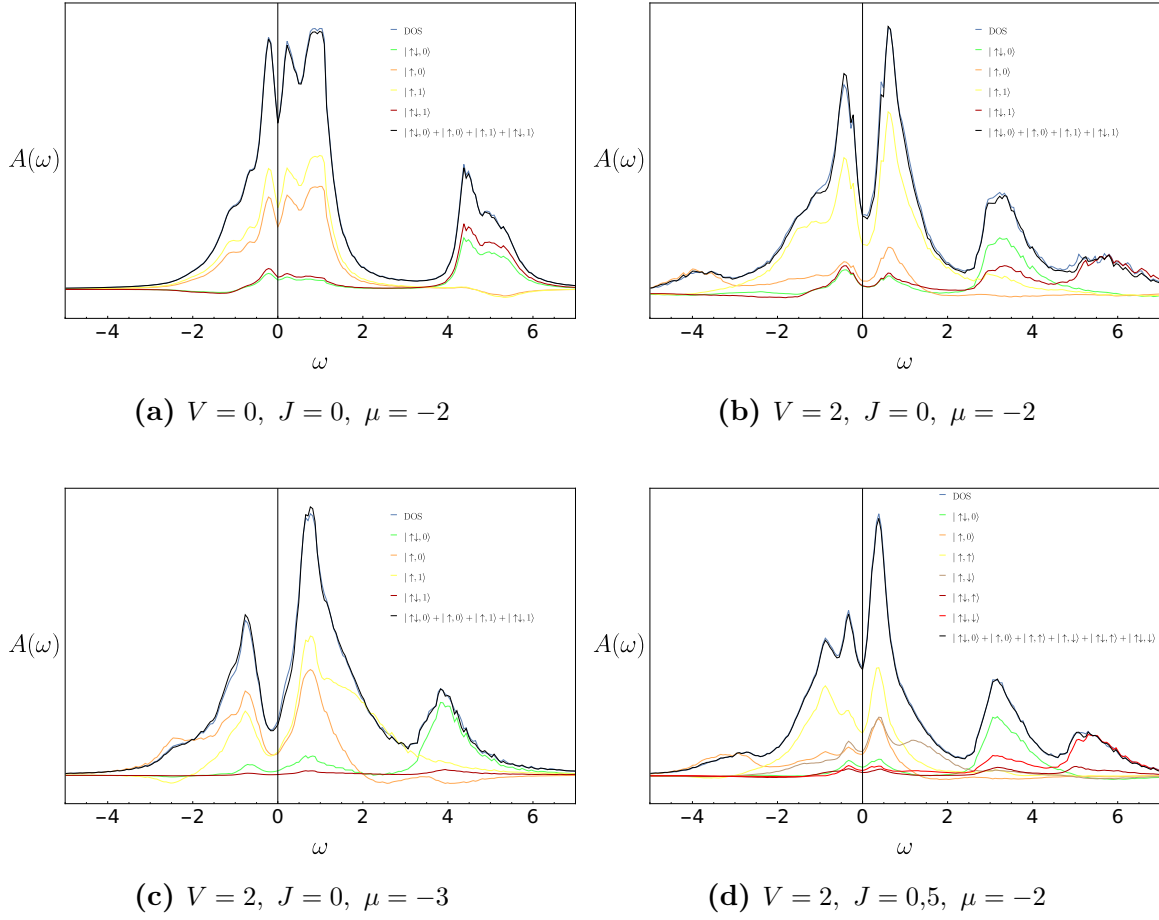
$$A_{|\uparrow\downarrow,1\rangle} := A_{|\uparrow\downarrow,\uparrow\rangle} + A_{|\uparrow\downarrow,\downarrow\rangle} = 2A_{|\uparrow\downarrow,\uparrow\rangle} , \quad (4.6)$$

ya que el hamiltoniano presenta esta simetría.

En ausencia de interacción inter-orbital ( $V = 0$ , dos cadenas de Hubbard no interactuantes), comprobamos que la UHB está compuesta por excitaciones incoherentes  $|\uparrow\downarrow, 0\rangle$  y  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$  mezcladas (Figura 4.6a). Como mostramos anteriormente (Figura 4.3a), al incluir interacción inter-orbital  $V = 2$  (Figura 4.6b) puede verse que la excitación HD ( $|\uparrow\downarrow, 0\rangle$ ) se separa formando un pico característico distinguible del resto de la UHB, que continúa formada básicamente por excitaciones  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle$ . Por otro lado, vemos que la componente de energías más negativas ( $\omega \approx -4$ ) de la DOS, proviene mayoritariamente de la transición  $|\uparrow, 0\rangle \rightarrow |0, 0\rangle$ , correspondiente al operador  $X_{\uparrow,0}$ . Disminuyendo el potencial químico a  $\mu = -3$  para lograr un mayor dopaje del sistema con huecos, observamos que el pico HD, además de aumentar su energía característica a  $\omega \approx 4$  (como analizamos en la Figura 4.3b), se vuelve casi pura excitación HD.

Al incluir acoplamiento de Hund  $J = 0,5$ , observamos el desdoblamiento esperado de las excitaciones  $|\uparrow, 1\rangle$  (resp.  $|\uparrow\downarrow, 1\rangle$ ) en  $|\uparrow, \uparrow\rangle \neq |\uparrow, \downarrow\rangle$  (resp.  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle \neq |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$ ). Como trabajo a futuro, estudiaremos las funciones respuestas de las combinaciones  $|\uparrow, \uparrow\rangle - |\uparrow, \downarrow\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$  (*singletes*) y  $|\uparrow, \uparrow\rangle + |\uparrow, \downarrow\rangle$ ,  $|\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$  (*tripletes*), que requieren cálculos más costosos.

En todos los casos estudiados, observamos que las excitaciones más cercanas al nivel de Fermi ( $\omega = 0$ ) están dadas principalmente por  $|\uparrow, \uparrow\rangle$  y  $|\uparrow, 0\rangle$ , también de acuerdo con la Tabla 3.1, donde vemos que es precisamente esta la excitación de menor energía sobre el estado fundamental para  $\mu \geq -2$ . Comprobamos también que la suma de las funciones espectrales que se obtienen de proyectar sobre cada una de estas configuraciones atómicas, reconstruye la DOS completa, pues  $\sum_{s_1, s_2} P_{s_1, s_2} = 1$ .



**Figura 4.6:** Densidad de estados y excitaciones  $|\uparrow\downarrow, 0\rangle, |\uparrow, 0\rangle, |\uparrow\downarrow, \uparrow\rangle, |\uparrow, \uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow, \downarrow\rangle$  y  $|\uparrow, \downarrow\rangle$ , en sistemas KH de bandas iguales.  $L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0.5$ ,  $U = 4$ .

La UHB se encuentra alrededor de  $\omega \approx 5$  para **a** y  $\omega = 6$  para **b** (con poco peso), para **c** y **d** queda a energías fuera del rango de las figuras.

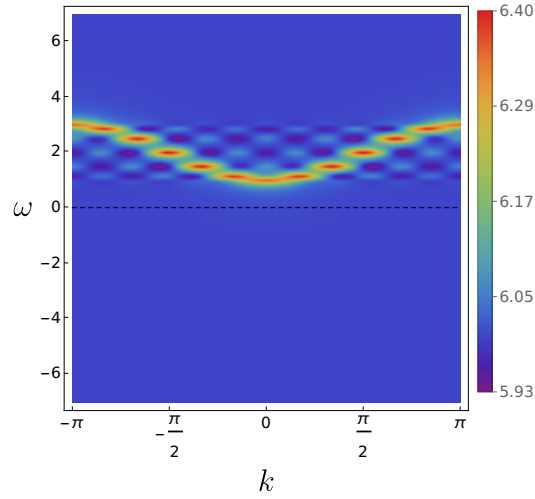
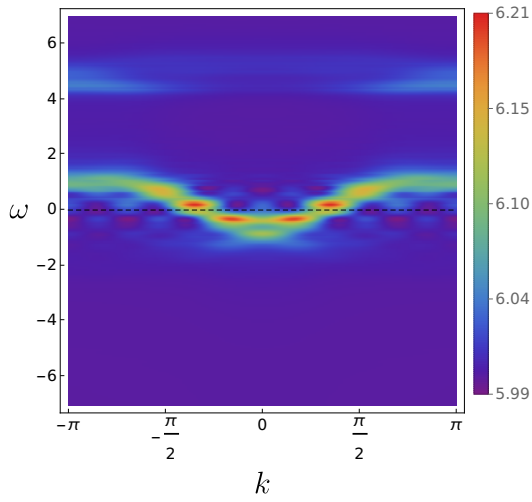
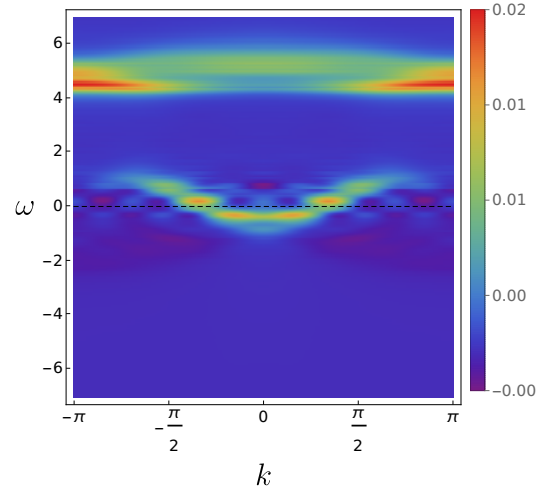
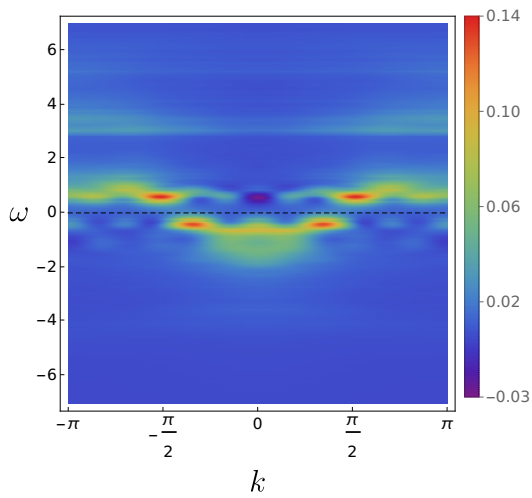
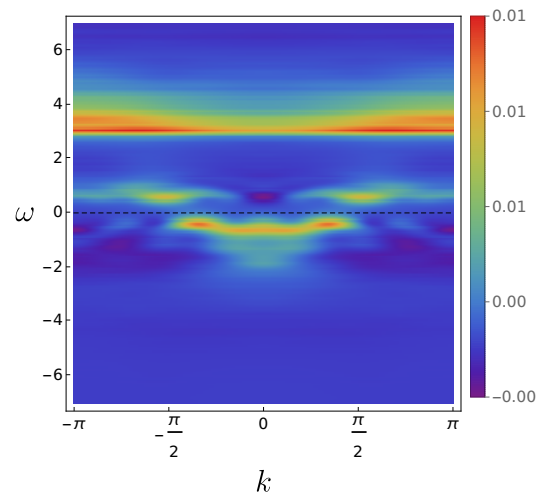
## 4.4. Funciones espectrales

Estudiamos también funciones espectrales  $A(k, \omega)$ , calculadas mediante transformadas de Fourier de funciones de Green en espacio real. O sea,

$$A(k, \omega) = \sum_{\delta=-L/2}^{L/2} e^{-ik\delta} A_{\delta}(\omega), \quad (4.7)$$

donde  $A_{\delta}$  es la función de Green correspondiente al proceso de crear un electrón en un sitio  $i$  y luego destruirlo en  $j = i + \delta$ . Para estos cálculos, agregamos al hamiltoniano los términos de hopping de borde faltantes para que el sistema tenga simetría de traslación.

Dado que el sistema (hamiltoniano) tiene condiciones periódicas de contorno (tiene forma de anillo), debería ser equivalente usar cualquier par de sitios  $(i, j)$  separados en  $\delta$ . Sin embargo, como las representaciones MPS/MPO no fuerzan la simetría de traslación, los resultados numéricos pueden diferir. Para evitar esto, usamos siempre  $i = \frac{1}{2}L$ , y  $j = \frac{1}{2}L + \delta$  en cada caso.

(a)  $A(k, \omega)$  para  $U = 0, V = 0$ (b)  $A(k, \omega)$  para  $U = 4, V = 0$ (c)  $A_{|\uparrow\downarrow,0\rangle}(k, \omega)$  para  $U = 4, V = 0$ (d)  $A(k, \omega)$  para  $U = 4, V = 2$ (e)  $A_{|\uparrow\downarrow,0\rangle}(k, \omega)$  para  $U = 4, V = 2$ 

**Figura 4.7:** Funciones espectrales  $A(k, \omega)$  y  $A_{|\uparrow\downarrow,0\rangle}(k, \omega)$ , en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund  $L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $J = 0$ ,  $\mu = -2$ , con condiciones periódicas de contorno. Las escalas de colores (unidades arbitrarias) se muestran solo para permitir la comparación entre  $A(k, \omega)$  y  $A_{|\uparrow\downarrow,0\rangle}(k, \omega)$  en cada sistema.

Para verificar la precisión de este método, comenzamos calculando el caso *tight-binding* (TB), o sea, el caso particular de un sistema KH con  $U = V = J = 0$ , del cual conocemos la solución exacta. Comprobamos que efectivamente obtenemos la relación de dispersión sinusoidal esperada (Figura 4.7a). Desde luego, la “curva” obtenida no es continua, sino que es realmente un conjunto de picos, con energía y momento definidos, asociados a cada autoestado TB. Para estos parámetros, vemos que el sistema se encuentra en estado vacío, ya que todas las excitaciones tienen energía positiva respecto del nivel de Fermi ( $\omega = 0$ ).

Al introducir interacción intra-orbital  $U = 4$ , pero sin interacción inter-orbital ( $V = 0$ ), se tienen dos cadenas de Hubbard no interactuantes entre sí. Se pierde la relación de dispersión TB, y se forman las dos bandas de Hubbard inferior (LHB) y superior (UHB). Las Figuras 4.7b y 4.7c muestran, respectivamente, las funciones espectrales  $A(k, w)$  y  $A_{|\uparrow\downarrow,0\rangle}(k, w)$  para un sistema con estos parámetros. Observamos que la excitación HD se encuentra dentro de las bandas de Hubbard en forma incoherente, como esperábamos.

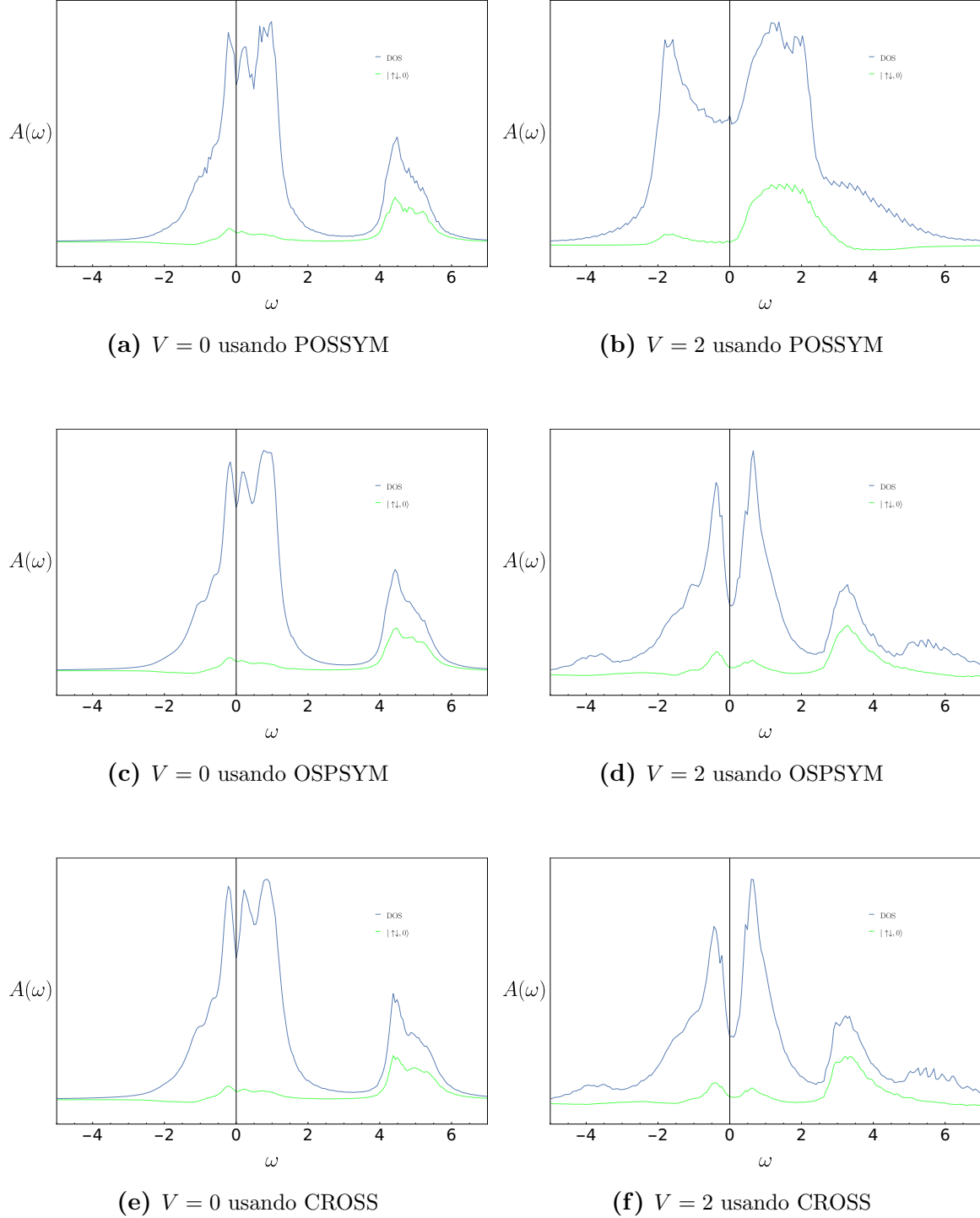
Finalmente, incorporamos también interacción inter-orbital  $V = 2$ , y observamos (Figuras 4.7d y 4.7e) claramente la disminución de la DOS cerca de  $\omega = 0$  y el angostamiento de los picos por sobre y debajo de la energía de Fermi. Distinguimos también la banda de HD a energías  $\omega \approx 3$ , separada de la UHB ( $\omega \approx 5$ ), que tiene su mayor peso en momentos  $k$  hacia el borde de la banda ( $|k| > \frac{\pi}{2}$ ) y muy poco en el centro ( $k \approx 0$ ). Queda como trabajo a futuro comprender más a fondo el comportamiento de estas excitaciones.

## 4.5. Comparación de órdenes MPS alternativos

Como explicamos en la subsección 2.8.2, el orden MPS que usamos para los resultados presentados en este trabajo salvo esta sección 4.5, lo adoptamos luego de un análisis comparativo de desempeño de varias propuestas. Los órdenes POS (Figura 2.12a) y OSP (Figura 2.12b) fueron los primeros que descartamos, ya que observamos una consistente mejoría en la convergencia al usar las variantes simétricas POSSYM (Figura 2.12c) y OSPSYM (Figura 2.12d), reflejada en energías menores para los estados fundamentales variacionales obtenidos.

En sistemas de dos cadenas de Hubbard no interactuantes ( $V = 0$ ) (Figuras 4.8a y 4.8c), no apreciamos diferencias significativas en los resultados usando POSSYM (Figura 4.8a) y OSPSYM (Figura 4.8c). Pero al incluir interacción inter-orbital  $V = 2$ , pudimos comprobar consistentemente que el orden POSSYM (Figura 4.8b) arroja resultados con mucho error, mientras que la precisión del OSPSYM (Figura 4.8d) no se ve notablemente afectada. Sin embargo, sí observamos polarización en espín en los estados fundamentales convergidos, comportamiento evidentemente no físico, ya que no está inducido por ninguna de las interacciones consideradas en el

hamiltoniano (1.1). Este problema no aparece al usar el orden CROSS implementado en este trabajo (Figura 2.13), con el cual comprobamos obtener para sistemas KH los resultados más precisos, reflejado en estados fundamentales variacionales de menor energía y que respetan las simetrías del hamiltoniano.

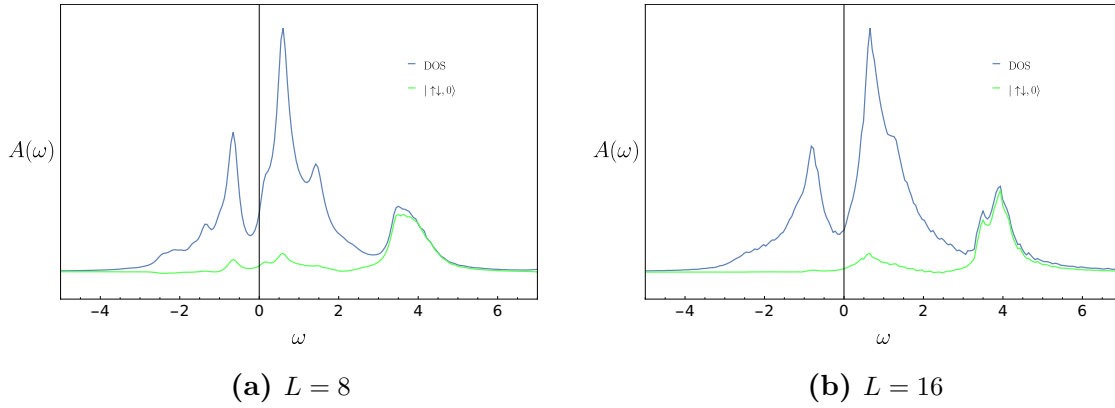


**Figura 4.8:** Comparación de resultados de densidad de estados (DOS) y excitación HD, en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund  $L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $U = 4$ ,  $J = 0$ ,  $\mu = -2$ , variando el orden de sitios en las representaciones MPS usadas para los cálculos de DMRG.

## 4.6. Análisis de tamaño

Con el objetivo de verificar que las características observadas en las densidades de estados no sean efectos de tamaño finito, sino que describan comportamientos físicos reales del sistema estudiado, realizamos también cálculos para tamaños menores y mayores. Las Figuras 4.9 muestran que, si bien hay pequeñas variaciones, de esperar ya que cambian los autoestados (discretos) del hamiltoniano, no se aprecian diferencias significativas en las bandas y los picos HD. Tomamos esto como indicador de que trabajamos con sistemas suficientemente grandes, como para capturar la física relevante que estamos estudiando.

Como trabajo a futuro para verificar estos cálculos, realizaremos corridas para sistemas mayores, que requieren de más tiempo de CPU, pero, dado estos resultados, no esperamos ver que las conclusiones relevantes cambien significativamente.

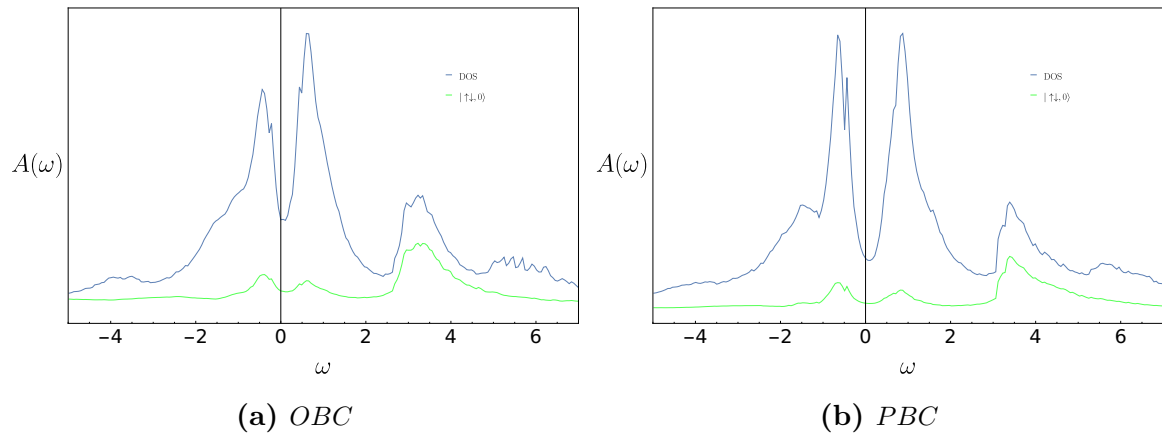


**Figura 4.9:** Comparación de densidades de estados y excitación HD al variar el tamaño de un sistema KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $U = 4$ ,  $V = 2$ ,  $J = 0$ ,  $\mu = -2$ .

## 4.7. Comparación con condiciones de contorno periódicas.

Para verificar la validez de los resultados de funciones espectrales presentados en la sección 4.4, calculados usando un hamiltoniano modificado agregando los términos de hopping de borde para conseguir la simetría de traslación, comprobamos que las densidades de estado efectivamente no dependen significativamente de las condiciones de contorno impuestas, como observamos en las Figuras 4.10.





**Figura 4.10:** Comparación de densidades de estados (DOS) y excitación HD al variar las condiciones de contorno en sistemas KH de bandas iguales sin acoplamiento de Hund  $L = 12$ ,  $t_1 = t_2 = 0,5$ ,  $U = 4$ ,  $V = 2$ ,  $J = 0$ ,  $\mu = -2$ .



# Capítulo 5

## Conclusiones

Estudiamos un modelo unidimensional de electrones correlacionados de dos orbitales conocido como modelo de Kanamori-Hubbard, que considera interacción coulombiana intra-orbital ( $U$ ) e inter-orbital ( $V$ ) y acoplamiento de Hund ( $J$ ). Realizamos cálculos numéricos usando programas basados en el método de DMRG (*Density-Matrix Renormalization Group*), implementados eficientemente usando representaciones de estados MPS (*Matrix-Product State*) y operadores MPO (*Matrix-Product Operator*). El código base de los programas usados fue desarrollado en el grupo de investigación, y fue adaptado en este trabajo para su aplicación al modelo particular estudiado. Se desarrolló también una implementación independiente sobre CUDA-C++ [34], explotando las ventajas de paralelización que ofrecen las tarjetas gráficas modernas. Los algoritmos usados nos permitieron calcular, con buena precisión, propiedades estáticas y dinámicas de los sistemas analizados.

Consideramos dos casos, uno en el que ambos orbitales forman bandas de diferente ancho, y otro en el que forman bandas iguales. Como resultado principal, para bandas de diferente ancho, encontramos excitaciones holón-doblón (HD), formadas por dos electrones en un orbital (doblón) acoplados a un hueco en el otro (holón), en este sistema lineal de dos orbitales en modelo extendido (sin aproximación local). Este resultado es consistente con la correlación observada en Ref. [24] (mediante DMFT en una red bidimensional cuadrada, usando DMRG como resolutor de impureza) entre una densidad de estados (DOS) finita en la energía de Fermi en una banda y el surgimiento en la otra banda de estados intra-gap de cuasipartículas HD bien definidos a energía  $\Delta = U - V$ . En el caso simétrico  $U = V$ , vemos que estos picos de cuasipartícula se localizan en el nivel de Fermi. Especialmente, obtuvimos realizaciones de la fase de Mott selectiva en orbital, y observamos la excitación HD intra-gap que surge en el orbital aislante producto del dopaje del orbital metálico.

Observamos también estas excitaciones doblón-holón en sistemas de bandas iguales. En este caso, vemos disminuciones de amplitud (*dips*) en las DOS en el nivel de Fermi,

que no parecen corresponder a gaps físicos de excitaciones, ya que al realizar un barrido en  $\mu$  dopando con huecos, no detectamos plateau en las curvas de ocupación alrededor de los valores de potencial químico correspondientes. Tampoco parece deberse a falta de estados alrededor de esta energía por efecto de tamaño finito, ya que no apreciamos cambios significativos en estos *dips* al calcular para sistemas de distinto tamaño. Basados en estos resultados, creemos que se trata de una característica real de estas DOS, o sea que refleja el comportamiento en el límite termodinámico, pero que no corresponde a un gap de excitaciones. No obstante, para tener evidencia sólida que confirme este resultado, proponemos como trabajo a futuro realizar cálculos para sistemas de mayor tamaño con buena precisión, que nos permita entender mejor el origen de estos *dips*.

Detectamos el cambio de estructura de las DOS de sistemas con interacciones intra- e inter-orbital en presencia de acoplamiento de Hund, particularmente el ensanchamiento de la banda HD, aunque no distinguimos una separación clara con  $J$  como muestran en [1]. Explicamos este ensanchamiento a partir de las energías de las configuraciones de sitios en el límite atómico, analizando el efecto de las interacciones de energía  $J$ , que realizan fluctuaciones de espín entre orbitales, y mezclan los niveles de HD, mediante hopping de pares, ensanchando el peso de las excitaciones con mayor componente de estos estados.

Caracterizamos las excitaciones del sistema, analizando la descomposición de las densidades de estados como suma de las funciones respuesta de operadores de creación-destrucción de cuasipartículas compuestas localizadas en un sitio de la red, proyectando los operadores de creación-destrucción de un electrón sobre el subespacio correspondiente a cada configuración atómica. Identificamos así, en zonas de parámetros representativas, a qué tipo de excitaciones se debe cada característica de las densidades de estados de este sistema: la banda de Hubbard superior, la componente holón-doblón, los estados cercanos al nivel de Fermi, y picos de energías más negativas.

Finalmente, calculando funciones espectrales en energía y momento en sistemas con interacciones intra- e inter-orbital, identificamos claramente la disminución de la densidad de estados cerca del nivel de Fermi, y el angostamiento de los picos por sobre y debajo de esta energía al aumentar la interacción inter-orbital. Distinguimos también la banda de HD a energías intra-gap, separada de la banda superior de Hubbard, que tiene su mayor peso en momentos cercanos al borde de la banda ( $|k| > \frac{\pi}{2}$ ) y muy poco en el centro ( $k \approx 0$ ). Como trabajo a futuro, queda comprender más a fondo este comportamiento.

Para la elección del orden de sitios en las representaciones MPS/MPO de DMRG, realizamos un estudio comparativo de resultados usando órdenes alternativos, de donde concluimos que el orden usado arroja los resultados más precisos para el modelo estudiado. Añadimos por completitud estas comparaciones, así como también los análisis de efectos de tamaño finito y condiciones de contorno, que presentamos a modo de

comprobación de la estabilidad de nuestros cálculos numéricos.

En resumen, usando un método numérico de avanzada que permite calcular propiedades electrónicas dinámicas con precisión, hemos logrado observar una estructura interesante en la densidad de estados electrónica de un modelo paradigmático: el modelo de Kanamori-Hubbard, particularmente las excitaciones holón-doblón que aparecen entre las conocidas bandas de Hubbard de este modelo. De esta forma, extendimos trabajos anteriores en que habían sido reportadas este tipo de excitaciones usando métodos basados en una aproximación local de la dinámica. El hecho de haberlas detectado en un modelo extendido como el que analizamos en esta tesis, su existencia en este sistema. Esperamos que futuros estudios de estas y otras excitaciones en detalle conduzcan a un entendimiento acabado de la dinámica de este tipo de sistemas.



# Bibliografía

- [1] Hallberg, N.-F. Y., K. *Subbands in the doped two-orbital Kanamori-Hubbard model*. Physical Review B, **102**, 245138, 2020. ix, 4, 6, 35, 36, 37, 43, 54
- [2] Keimer, M.-J., B. *The physics of quantum materials*. Nature Phys, 2017. 1
- [3] Richter, K. *Semiclassical theory of mesoscopic quantum systems*. Springer Berlin, **16**, 2000. URL <http://www.physik.uni-regensburg.de/forschung/richter/richter/pages/research/springer-tracts-161.pdf>. 1
- [4] Wang, J., Zhang, S.-C. *Topological states of condensed matter*. Nature Materials, **16** (11), 1062–1067, 2017. 1
- [5] Fulde, P. *Electron correlations in molecules and solids*. Springer Series in Solid State Science, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, **100**, 1995. 1
- [6] Mott, N. *Metal-insulator transition*. Reviews of Modern Physics, **40** (4), 677, 1968. 1
- [7] Tinkham, M. *Introduction to Superconductivity*. Dover Publications, 2004. URL <https://articles.google.com/ar/articles?id=VpUk3NfwDIkC>. 1
- [8] Fulde, P. *Introduction to the theory of heavy fermions*. Journal of Physics F: Metal Physics, **18** (4), 601, 1988. 1
- [9] White, S. R. *Density Matrix formulation for quantum Renormalization Groups*. Physical Review Letters, **69** (19), 2863, 1992. 1, 10
- [10] Peschel, I., Wang, X., Kaulke, M., Hallberg, K. *Density-Matrix Renormalization-a New Numerical Method in Physics*. Springer, 1999. 1, 10, 23, 28
- [11] Schollwöck, U. *The density-matrix renormalization group*. Reviews of Modern Physics, **77** (1), 259, 2005. 1
- [12] Hallberg, K. A. *New trends in density matrix renormalization*. Advances in Physics, **55** (5-6), 477–526, 2006. 1

- [13] Prelovšek, P., Bonča, J. *Ground state and finite temperature Lanczos methods*. Strongly Correlated Systems, **176**, 1–30, 2013. [1](#), [25](#)
- [14] Avella, A., Mancini, F. *Strongly Correlated Systems*. Springer, **176**, 2013. [1](#)
- [15] Schönhammer, K. *Luttinger liquids: the basic concepts*. Strong interactions in low dimensions, págs. 93–136, 2004. [2](#)
- [16] Auslaender, O., Steinberg, H., Yacoby, . A., Tserkovnyak, . Y., Halperin, B., Baldwin, K., *et al.* *Spin-charge separation and localization in one dimension*. Science, **308** (5718), 88–92, 2005. [2](#)
- [17] Hallberg, K., Aligia, A., Kampf, A. P., Normand, B. *Spin-charge separation in Aharonov-Bohm rings of interacting electrons*. Physical review letters, **93** (6), 067203, 2004. [2](#)
- [18] González, J., Martín-Delgado, M. A., Sierra, G., Vozmediano, A. H. *The Mott Transition and the Hubbard Model*. Quantum Electron Liquids and High-Tc Superconductivity, págs. 151–173, 1995. [2](#)
- [19] Bauernfeind, D., Triebl, R., Zingl, M., Aichhorn, M., Evertz, H. G. *Dynamical mean-field theory on the real-frequency axis: p-d hybridization and atomic physics in SrMnO3*. Physical Review B, **97** (11), 115156, 2018. [2](#)
- [20] Yee, C.-H., Kotliar, G., Haule, K. *Valence fluctuations and quasiparticle multiplets in plutonium chalcogenides and pnictides*. Physical Review B, **81** (3), 035105, 2010. [2](#)
- [21] Georges, A., Medici, L. d., Mravlje, J. *Strong Correlations from Hund’s Coupling*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 2013. [3](#), [5](#)
- [22] Berg, E., Fradkin, E., Kivelson, S. A. *Pair-density-wave correlations in the Kondo-Heisenberg model*. Physical review letters, **105** (14), 146403, 2010. [3](#)
- [23] Koga, A., Kawakami, N., Rice, T., Sigrist, M. *Orbital-selective Mott transitions in the degenerate Hubbard model*. Physical review letters, **92** (21), 216402, 2004. [3](#), [39](#)
- [24] Núñez-Fernández, Y., Kotliar, G., Hallberg, K. *Emergent low-energy bound states in the two-orbital Hubbard model*. Physical Review B, **97** (12), 2018. [3](#), [35](#), [41](#), [53](#)
- [25] Schlappa, J., Wohlfeld, K., Zhou, K., Mourigal, M., Haverkort, M., Strocov, V., *et al.* *Spin-orbital separation in the quasi-one-dimensional Mott insulator Sr2CuO3*. Nature, **485** (7396), 82–85, 2012. [3](#)



- [26] Kugel, K. I., Khomskii. *The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds*. Soviet Physics Uspekhi, **25** (4), 231, 1982. [3](#)
- [27] Dagotto, E., Yunoki, S., Malvezzi, A., Moreo, A., Hu, J., Capponi, S., *et al.* *Ferromagnetic Kondo model for manganites: Phase diagram, charge segregation, and influence of quantum localized spins*. Physical Review B, **58** (10), 1998. [3](#), [4](#)
- [28] Yang, C., Feiguin, A. E. *Excitonic density waves, biexcitons, and orbital-selective pairing in two-orbital correlated chains*. Physical Review B, **98** (3), 035128, 2018. [3](#)
- [29] Georges, A., Kotliar, G., Krauth, W., Rozenberg, M. J. *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*. Reviews of Modern Physics, **68** (1), 13, 1996. [4](#)
- [30] Kanamori, J. *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*. Progress of Theoretical Physics, **30** (3), 275–289, 09 1963. URL <https://doi.org/10.1143/PTP.30.275>. [5](#), [6](#)
- [31] Sherman, A. *Hubbard-Kanamori model: spectral functions, negative electron compressibility, and susceptibilities*. Physica Scripta, **95** (9), 095804, 2020. [6](#)
- [32] Núñez, Y. URL <https://sourceforge.net/projects/dmrg-qc>. [7](#)
- [33] Schollwöck, U. *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Annals of Physics, **326** (1), 96–192, 2011. [7](#), [12](#)
- [34] Fernández, H. *CUDA-Cpp paralelized Ground-State DMRG*. URL [https://github.com/HernanFdez/CUDA-Cpp\\_paralelized\\_Ground-State-DMRG.git](https://github.com/HernanFdez/CUDA-Cpp_paralelized_Ground-State-DMRG.git). [7](#), [53](#)
- [35] Wilson, K. G. *The Renormalization Group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Reviews of Modern Physics, **47** (4), 773, 1975. [9](#)
- [36] Ekert, A., Knight, P. L. *Entangled quantum systems and the Schmidt decomposition*. American Journal of Physics, **63** (5), 415–423, 1995. [9](#)
- [37] Koch, E. *The Lanczos Method*. German Research School for Simulation Sciences, 2011. [25](#)
- [38] Gutknecht, M. H. *A brief introduction to Krylov space methods for solving linear systems*. págs. 53–62, 2007. [25](#)
- [39] Núñez, Y. *Desarrollo y aplicación de métodos computacionales de avanzada para el cálculo de propiedades electrónicas de materiales correlacionados*. Tesis Carrera de Doctorado en Física, Instituto Balseiro. [28](#)

- 
- [40] Altshuler, B. L., Aronov, A. G. *Electron–electron interaction in disordered conductors*. **10**, 1–153, 1985. [29](#)
- [41] Marozzi, D. F. *Optimización de la renormalización numérica utilizando información cuántica: aplicación a modelos de una impureza interactuante*. Tesis de Maestría en Física, Instituto Balseiro. [31](#)
- [42] Núñez, Y. URL <https://github.com/yurielnf/exactdiagg>. [31](#)
- [43] Ramasesha, S., Pati, S. K., Krishnamurthy, H., Shuai, Z., Brédas, J. *Low-lying electronic excitations and nonlinear optic properties of polymers via symmetrized density matrix renormalization group method*. *Synthetic metals*, **85** (1-3), 1019–1022, 1997. [33](#)
- [44] Ronca, E., Li, Z., Jimenez-Hoyos, C. A., Chan, G. K.-L. *Time-step targeting time-dependent and dynamical density matrix renormalization group algorithms with ab initio Hamiltonians*. *Journal of chemical theory and computation*, **13** (11), 5560–5571, 2017. [35](#)
- [45] Komijani, Y., Hallberg, K., Kotliar, G. *Renormalized dispersing multiplets in the spectrum of nearly Mott localized systems*. *Physical Review B*, **99** (12), 125150, 2019. [35](#)
- [46] Kugler, F. B., Lee, S.-S. B., Weichselbaum, A., Kotliar, G., Von Delft, J. *Orbital differentiation in Hund metals*. *Physical Review B*, **100** (11), 115159, 2019. [35](#)
- [47] Niu, Y., Sun, J., Ni, Y., Liu, J., Song, Y., Feng, S. *Doublon-holon excitations split by Hund’s rule coupling within the orbital-selective Mott phase*. *Physical Review B*, **100** (7), 075158, 2019. [42](#)

# Agradecimientos

A mi familia. A mis padres, mis primeros y más constantes y exigentes maestros, de matemáticas, mecánica, lectura, buceo, música, conducción, francés, innumerables; pero fundamentalmente, mis incansables guías en el más extenso y cuidadoso curso sobre cómo ser siempre hoy mejor persona que ayer. A mi ñunguina, mi mayor orgullo y continua fuente de inspiración, primer y último pensamiento de cada día, a quien único no podré permitirme decepcionar jamás.

A mis amigos todos. A quien no pasó un día sin escribirme, recomendarme un tema interesante a investigar, o mandarme un meme. A quien me demostró que años y paralelos no significan distancia. A quien debo conocimientos e interpretaciones imposibles de sobrestimar. A quien me enseñó a nunca hacerme una imagen preconcebida. A quien pudo soportarme par de años de convivencia y quedándole ganas de hacer chistes y explicarme reactores. A quien me escuchó las más locas teorías de madrugadas de sólidos. A quien me hizo ver cuánto puede aprovecharse cada minuto. A quien compartió incontables juegos, sixpacks e historias. A quien queda solo en mi memoria, pero ahí estará siempre. A la comunidad cubichi del Balseiro, nuestro pedacito de Cuba en Bariloche. A toda la gente buena que he tenido la fortuna de conocer.

A mis más influyentes profesores. A quien logró, en solo una clase de física de preuniversitario, cambiarle a un niño por completo el mundo. A quien sabía, sin plantear una integral, hacerme redescubrir y entender conceptos que antes parecían inalcanzables. A quien supo ser, al mismo tiempo, excelente educadora e investigadora, y una de las personas más divertidas y ocurrentes que he conocido. Y finalmente, a quien me ha acompañado, como directora y amiga, en esta tan particular aventura de maestría en tiempos de la covid.

A todos, gracias.

